

物理数学：講義ノート

白石直人

1 はじめに

物理数学、要するに物理に必要な数学というと、ぱっと思いつく範囲で例えば以下のような内容が挙げられる。

- 複素関数論：留数積分、ローラン展開など
- 微分方程式：微分方程式の一般論、特殊関数など
- その他解析：フーリエ変換、ルベーグ積分など
- 群の表現：群の基本、ユニタリ群や直交群、既約表現、ルートとウェイトなど
- 幾何：トポロジー、微分幾何など
- 線形代数の応用：正定値、特異値など
- 確率論の応用：母関数、集中不等式など
- 情報科学の知見：各種エントロピー、情報幾何、計算論など

ただし幸いなことに駒場には数学科があり、また統合自然科学科においては数学科教員による数学の科目が多数開講されている。上記の中だと、複素関数論、常微分方程式論、フーリエ変換、ルベーグ積分、群論、幾何などは、そうした他科目で修得できる。また情報科学については、「情報と計算の物理」という科目が別個開講されている。これらと重複する内容の講義を行っても仕方がないので、この物理数学の講義では「物理では必要になるものの、数学科の講義などではなかなか取り扱われない内容」として、「線形代数の応用」「確率論の応用」「微分方程式と特殊関数」の3つを取り上げ、これらを物理数学 I、物理数学 II の1年間で見ていきたいと思う。

第I部

線形代数の応用

2 線形代数の復習と行列の関数

ここでは、1年生で習った線形代数の結果を、主に線形変換の視点から復習し、併せて行列の関数を導入する。

2.1 対角化可能な行列の基本性質

ベクトルに対する行列の作用 $v \rightarrow Av$ は、ベクトルに対する線形変換¹ とみなせる。線形変換を行うと、一般にはベクトルは向きの違う別のベクトルへと移される。座標全体で考えれば、基底ベクトルが作る格子が、向きを変えて変形させられた別の格子に移されるということでもある。しかし、ベクトルによっては、線形変換を施しても向きが変わらず、長さだけが変わる場合がある。例として、

$$A = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 5 & 1 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

という行列による線形変換を考えよう。この線形変換を施した際、ベクトル $\begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix}$ と $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ はそれぞれ

$$\frac{1}{3} \begin{pmatrix} 5 & 1 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} = 1 \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

$$\frac{1}{3} \begin{pmatrix} 5 & 1 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

というベクトルに移され、大きさが変わるだけで向きは変化しない。なので、ベクトル $\begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix}$ と $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ に沿った(斜向)座標で見れば、線形変換 A は、座標軸に沿った伸縮だけで記述できる(図1)。このような記述は非常に便利だし理解も明快になる。一般に

$$Av_i = \lambda_i v_i \quad (2.4)$$

が成り立つ ($\lambda_i \in \mathbb{C}$) とき、ベクトル v_i を A の「(右)固有ベクトル ((right) eigenvector)」といい、 λ_i (伸縮の大きさ) を v_i の「(右)固有値 ((right) eigenvalue)」という。また式(2.4)を「固有値方程式」という。特に、固有ベクトルだけでベクトル空間全体が張られている場合には、固有ベクトルを基底としてベクトルの展開を行えば、その線形変換(行列の作用)は各軸ごとに定数倍するだけなので、線形変換の取り扱いが非常に容易になる。

線形変換を特徴づけるという観点から見ると、固有ベクトルは「線形変換の向きを規定している」とも言える。例えば、二つの行列 A, B において、固有ベクトルがベクトル空間全体を張っていて、かつ両者の固有ベクトルが一致しているならば、この二つの行列は可換である。逆に、二つの行列が可換ならば、同時固有ベクトル² (と一般化固有ベクトル) でベクトル空間全体の基底をとることが出来る。(このあたりの話はのちに詳しく述べる)。

上の説明では、縦ベクトルに左から行列を作用させたが、横ベクトルに右から行列を作用させることもで

¹ベクトル v, u とスカラー a, b に対し、 $f(av + bu) = af(v) + bf(u)$ を満たす写像 f を線形写像ないし線形変換という。

²行列 A, B に対し、どちらの固有ベクトルでもあるようなベクトルを「同時固有ベクトル」という

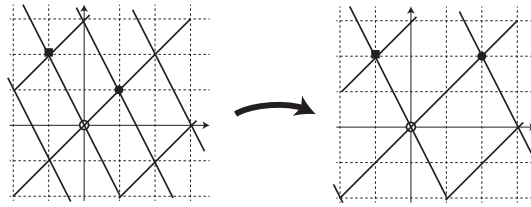


図 1: 固有ベクトルのイメージ図。二つの固有ベクトルで作られる斜向座標で見ると、線形変換 A の作用は、単に各軸に沿っての引き延ばしのみとなる。

きる。式 (2.4) と同様に、横ベクトル \mathbf{u}_j について

$$\mathbf{u}_j A = \lambda_j \mathbf{u}_j \quad (2.5)$$

が成り立つとき、 \mathbf{u}_j を「左固有ベクトル」、 λ_j を「左固有値」という。 \mathbf{u}_j, λ_j が A の左固有ベクトル、左固有値のとき、 \mathbf{u}_j^\top (\mathbf{u}_j の転置) は A^\top の固有値 λ_j の右固有ベクトルである。

定理 2.1. 任意の正方行列について、以下が成り立つ。

1. 右固有値と左固有値は一致する。
2. 異なる固有値に属する右固有ベクトルと左固有ベクトルの積はゼロとなる³。

この 1 の性質は、 A と A^\top の右固有値が一致するということでもある。

証明. 1 の証明: 特性方程式が転置しても一致する、すなわち

$$\det[A - \lambda I] = \det[A^\top - \lambda I] \quad (2.6)$$

という関係があることからすぐに確認できる。(A の左固有値と A^\top の右固有値は同じものである点に注意)

2 の証明: 行列 A の固有値 λ_1 の右固有ベクトルを \mathbf{v}_1 、固有値 $\lambda_2 (\neq \lambda_1)$ の左固有ベクトルを \mathbf{u}_2 とすると

$$\lambda_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{v}_1 = \mathbf{u}_2 A \mathbf{v}_1 = \lambda_1 \mathbf{u}_2 \mathbf{v}_1 \quad (2.7)$$

より $\mathbf{u}_2 \mathbf{v}_1 = 0$ が導ける。 □

これらの性質により、対角化可能な行列 A について、左右の固有ベクトルを $\mathbf{u}_i \mathbf{v}_i = 1$ となるように規格化しておく⁴ と

$$A = \sum_i \lambda_i \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i \quad (2.8)$$

と書くことが出来る。あるいは別の言い方をすると、固有ベクトルの規格化の条件より

$$\begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{u}_n \end{pmatrix} (\mathbf{v}_1 \ \cdots \ \mathbf{v}_n) = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

³これは、左右の固有ベクトルは双対基底の関係だということである。

⁴縮退がある場合は、左右の両固有空間が同じだけの次元を持っており、それぞれ適切な固有ベクトル同士の組を作ることが出来るので、その組同士で規格化を行う。

と左右の固有ベクトルを並べた行列同士は逆行列の関係にあるので、 $V := (\mathbf{v}_1 \ \dots \ \mathbf{v}_n)$ と置くと

$$V^{-1}AV = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{u}_n \end{pmatrix} A (\mathbf{v}_1 \ \dots \ \mathbf{v}_n) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

と A は対角化される。

以降この講義では、明記しない限り固有ベクトルは右固有ベクトルを指すものとする。

これまで一般の行列の固有値や対角化を見てきた。次に、エルミート行列という特定のクラスの行列の性質を考察しよう。エルミート行列は量子力学において物理量と対応する行列であり、そのためエルミート行列をうまく取り扱えることは、特に物理を学ぶうえでは極めて重要である。

- 定理 2.2.** 1. エルミート行列の固有値はすべて実数である。
2. エルミート行列の異なる固有値に属する（右）固有ベクトルは、互いに直交している。
3. エルミート行列は対角化できる。特に対角化する際の行列としてユニタリ行列が取れる⁵。

証明. 1 (固有値が実数であること): \mathbf{x} をエルミート行列 H の固有値 λ の固有ベクトルとすると、

$$\lambda |\mathbf{x}|^2 = \mathbf{x}^\dagger [H\mathbf{x}] = [\mathbf{x}^\dagger H]\mathbf{x} = (\mathbf{x}^\dagger [H^\dagger \mathbf{x}])^* = (\mathbf{x}^\dagger [H\mathbf{x}])^* = \lambda^* |\mathbf{x}|^2 \quad (2.11)$$

が一般に成り立つ。ただし $*$ は複素共役を表す。 $|\mathbf{x}|^2 \neq 0$ なので、 $\lambda^* = \lambda$ 、つまり固有値は実数であることが言える。ここで3つ目の等号では $\mathbf{y}^\dagger \mathbf{x} = (\mathbf{x}^\dagger \mathbf{y})^*$ が成り立つことを用いた。

2 (固有ベクトル同士の直交性): エルミート行列の場合には右固有ベクトルの複素転置が左固有ベクトルになることから容易に確認できる。

3 (ユニタリ対角化): 厳密に示すのは実は少し面倒くさい。ここでは、以下のシューア分解を事実と認めて議論を進める⁶。

定理 2.3 (シューア分解 (Schur decomposition)). 任意の行列 A は、ユニタリ行列 U と上三角行列 B を用いて $U^\dagger AU = B$ と書ける

A がエルミート行列 H の場合には、

$$B = U^\dagger H U = (U^\dagger H^\dagger U)^\dagger = (U^\dagger H U)^\dagger = B^\dagger \quad (2.12)$$

という関係が成り立つ。ところが B は上三角、 B^\dagger は下三角なので、両者が一致するには B が対角行列になるしかない。このとき $B = U^\dagger H U$ は H のユニタリ対角化そのものである。□

[2-1]. シューア分解で得られる上三角行列 B の対角項は、 A の固有値であることを示せ。ただしシューア分解できることは事実として認めてよい。

⁵なお、ユニタリ対角化の方法は、行および列を入れ替える自明な自由度を除けば一意的であることも示せる。

⁶シューア分解可能であることは、行列サイズ n の帰納法を用いて示せる。以下概略を示す。

行列 A には、少なくとも一つの固有値 λ と対応する固有ベクトル \mathbf{v} が存在する。ここで、 $\mathbf{u}_1 = \mathbf{v}$ とする正規直交基底 $\{\mathbf{u}_i\}$ をとり、これを横に並べたユニタリ行列を $U = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n)$ とする。すると、 $C := U^\dagger A U$ において、 $C_{21}, C_{31}, \dots, C_{n1}$ はすべてゼロである。帰納法の過程により、 C の右下の $(n-1) \times (n-1)$ 行列を上三角化するユニタリ行列 V が存在する。この V を用いて $W = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^\top \\ \mathbf{0} & V \end{pmatrix}$ というユニタリ行列を定義すると、 $W^\dagger C W = (UW)^\dagger A UW$ は上三角行列になる。

3の事実から、エルミート行列の固有状態たちはベクトル空間の正規直交基底をなすことが言える。実際、対角化に用いたユニタリ行列を「縦ベクトルを並べたもの」と解釈するならば、これらの縦ベクトルたちがまさに欲しかった正規直交基底そのものである。

ユニタリ行列が「空間の回転」であることを思い出せば、ユニタリ対角化は、エルミート行列の作用が「回転した各直交座標軸に沿った引き延ばし」という意味を持つことを明らかにしてくれる。

2.2 AB と BA の関係

行列は一般には可換でないので、 $AB \neq BA$ である。しかし、固有値だけ見れば両者は一致する⁷。

定理 2.4. 任意の $n \times n$ 行列 A, B について、 AB と BA の固有値は代数的重複度⁸を含めて一致する。

証明. 極めて天下りだが、 x を変数として、以下の二つのブロック行列の恒等式

$$\begin{pmatrix} I & -A \\ O & xI \end{pmatrix} \begin{pmatrix} xI & A \\ B & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} xI - AB & O \\ xB & xI \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

$$\begin{pmatrix} I & O \\ -B & xI \end{pmatrix} \begin{pmatrix} xI & A \\ B & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} xI & A \\ O & xI - BA \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

を考えよう。この行列式を考えると、それぞれの式からは

$$x^n \det \begin{pmatrix} xI & A \\ B & I \end{pmatrix} = x^n \det[xI - AB] \quad (2.15)$$

$$x^n \det \begin{pmatrix} xI & A \\ B & I \end{pmatrix} = x^n \det[xI - BA] \quad (2.16)$$

が得られる。両者は多項式として一致するので AB と BA の特性方程式は一致する。

$$\det[xI - AB] = \det[xI - BA] \quad (2.17)$$

すなわち、 AB と BA の固有値は、その代数的重複度を含めて一致する。 □

次に $AB = BA$ が成り立つ (A と B が可換である) 状況を考えよう。この状況は、どういうときに実現するのだろうか。また、 $AB = BA$ が成り立つならば、どういうことが言えるのだろうか⁹。

まず、一般の行列 A, B の場合の結果について述べる。

定理 2.5. $AB = BA$ とする。このとき、任意の A の固有値 a_i に対し、適切な B の固有値 b_j と同時固有ベクトル $\mathbf{x}_{i,j}$ が存在し、

$$A\mathbf{x}_{i,j} = a_i\mathbf{x}_{i,j}, \quad B\mathbf{x}_{i,j} = b_j\mathbf{x}_{i,j} \quad (2.18)$$

が成り立つ。

⁷以下では一般の場合に対して証明しているのでかなりトリッキーな方法を用いているが、 B が正則ならば $\det[AB - \lambda I] = \det[B(AB - \lambda I)B^{-1}] = \det[BA - \lambda I]$ と、 AB と BA の特性方程式が一致することは簡単に示せる。

⁸特性方程式 $\det[A - \lambda I] = 0$ における重解の度合いのこと。

⁹この辺りの話はラックス『線形代数』第6章、山本『行列解析の基礎』第5章などに出ている。

証明. A の固有値 a_i の固有空間を V_i^a とする。この固有空間の任意のベクトル $\mathbf{x} \in V_i^a$ について、

$$A(B\mathbf{x}) = BA\mathbf{x} = a_i(B\mathbf{x}) \quad (2.19)$$

が成り立つので、 $B\mathbf{x} \in V_i^a$ と分かる。つまり B は V_i^a を不変に保つ線形変換である。 B の作用を V_i^a に制限すると、制限された B はこの空間 V_i^a 内の線形変換なので、固有値と V_i^a 内の固有ベクトルを持つ¹⁰。それを一つ選べば、それが求めている b_j と $\mathbf{x}_{i,j}$ である。□

A, B がエルミート行列である場合¹¹ には、同時固有ベクトルだけでベクトル空間全体を張ることができる。

定理 2.6. エルミート行列 A, B が与えられている。このとき以下は同値。

1. $AB = BA$ が成り立つ。
2. A と B の同時固有ベクトルでベクトル空間全体を張ることができる。

証明. $2 \Rightarrow 1$: 同時固有ベクトル $\{\mathbf{x}_{i,j}\}_{i,j}$ ($A\mathbf{x}_{i,j} = a_i\mathbf{x}_{i,j}$, $B\mathbf{x}_{i,j} = b_j\mathbf{x}_{i,j}$) がベクトル空間全体を張っているとすると、任意のベクトル \mathbf{y} は、同時固有ベクトルの線形結合の形で $\mathbf{y} = \sum_{i,j} c_{ij}\mathbf{x}_{i,j}$ と書くことができる。このとき、 $(AB - BA)\mathbf{y} = \sum_{i,j} c_{ij}(a_i b_j - b_j a_i)\mathbf{x}_{i,j} = \mathbf{0}$ が得られる。すなわち $AB - BA$ はゼロ行列である。これは命題 1 を意味する。

$1 \Rightarrow 2$: ベクトル空間全体は A の固有空間の直和 $V_1^a \oplus V_2^a \oplus \dots$ で表せるので、 B の固有値 b_j の固有ベクトル \mathbf{y}_j は、各固有空間の元の線形結合 $\mathbf{y}_j = \sum_i c_i \mathbf{y}_{i,j}$ ($\mathbf{y}_{i,j} \in V_i^a$) の形で一意的に書ける。ところが、これを固有値方程式 $B\mathbf{y}_j = b_j\mathbf{y}_j$ に代入すると

$$\sum_i c_i B\mathbf{y}_{i,j} = B\mathbf{y}_j = b_j\mathbf{y}_j = \sum_i c_i b_j \mathbf{y}_{i,j} \quad (2.20)$$

となる。定理 2.5 の証明で示したように $B\mathbf{y}_{i,j} \in V_i^a$ なので、各固有空間の要素を比較することで、 $B\mathbf{y}_{i,j} = b_j\mathbf{y}_{i,j}$ を得る。すなわち、 $\mathbf{y}_{i,j}$ は実は A の固有値 a_i 、 B の固有値 b_j の同時固有ベクトルであると分かる。 \mathbf{y}_j たちはベクトル空間を張っており、各 \mathbf{y}_j は $\mathbf{y}_{i,j}$ たちに展開され、その一つ一つが同時固有ベクトルなので、結局ベクトル空間全体が同時固有ベクトル $\mathbf{y}_{i,j}$ たちで張れることが示されたことになる。□

[2-2]. 3×3 のエルミート行列 A, B で、一方が他方の定数倍ではなく、また A, B はともに単位行列の定数倍でもないもので、 $AB = BA$ を満たす行列の例を一つ挙げよ。

2.3 スペクトル理論とジョルダン標準形

行列は対角化出来ると取り扱いが楽になるが、全ての行列が対角化出来るわけではない。ここでは、対角化できない場合も含めた一般的な行列の性質や取り扱いを考察しよう。

そのためにまず、「対角化できない行列」はどのような性質を持っているのか、その行列の線形変換ではどうなことが起きるのか、を見ることにしよう。対角化できない行列の例として

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

を考えよう。固有方程式 $f_A(x) = 0$ を解くと、 $x = 2$ が重解として得られる。固有値 2 に対応する固有ベクトルは

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

¹⁰ そもそも行列とは、ベクトル空間の線形変換の表現であることに注意。

¹¹ より一般に、 A, B がともに対角化可能な行列ならば、以下の定理は成り立つ。

であり、これ以外の固有ベクトルは存在しないことも簡単に確認できる。

では、これ以外の向きのベクトルでは何が起きているのだろうか。これと直交するベクトルとして $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ がある。このベクトルに対する線形変換 A の作用は

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

である。つまり、ベクトル $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ もまた線形変換 A によって2倍に引き伸ばされているが、それと同時に、それと直交する向きのベクトル $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ が足されてしまっている。言い換えると、図2のように、伸ばすと同時に平行移動が付け加わり、この平行移動の効果のため、この変換において「向きが変わらないベクトル」はただ一つ $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ のみとなっている。

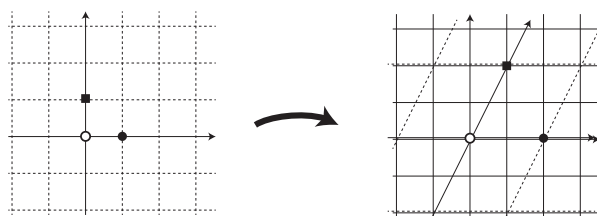


図2: 対角化できず、一般化固有ベクトルが必要になる線形変換の例。

しかし、 $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ も $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ も、ともに「その方向への長さは2倍に引き伸ばされる空間」の中におり、余計にくっついたベクトルもまたこの空間内のものである。つまり、この空間内だけで議論を閉じさせることが出来る。そのため、何らかの形で $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ も固有ベクトルの拡張として取り扱えないかを考えてみることにする。そのような発想で導入されるのが「一般化固有ベクトル (generalized eigenvector)」である。

固有ベクトル x が固有値 λ に対応することは、

$$(A - \lambda I)x = \mathbf{0} \quad (2.24)$$

を満たすことと同じである。そこでこれを一般化して、

$$(A - \lambda I)^m x = \mathbf{0} \quad (2.25)$$

を満たすベクトルまで考えることにする。特に、上式を満たすが

$$(A - \lambda I)^{m-1} x \neq \mathbf{0} \quad (2.26)$$

となる x を「階数 m の一般化固有ベクトル」という。先程の例であれば、線形変換 $(A - 2I)$ の作用の下で

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \mathbf{0} \quad (2.27)$$

と写されていくので、 $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ は階数 2 の一般化固有ベクトルである。

このとき、以下の非常に重要な定理が得られる¹²。

定理 2.7 (スペクトル定理¹³ (spectral theorem)). n 次元ベクトル空間の線形写像 A の固有ベクトルと一般化固有ベクトル全体は、 n 次元ベクトル空間全体を張る。

この定理は、線形変換 A の n 次元ベクトル空間への作用がどのようなものであるかに対する、一つの完全な特徴づけを行っている。

証明. スペクトル定理を証明するために、まず行列の多項式の作用の考察から始めよう。2 つの複素係数多項式 $f(x)$ と $g(x)$ で、共通のゼロ点を持たない、つまり $f(x) = 0$ かつ $g(x) = 0$ となる共通の x は存在しないものを考える。これに対し、行列の多項式 $f(A)g(A)$ が作用してゼロとなるベクトル \mathbf{x}

$$f(A)g(A)\mathbf{x} = \mathbf{0} \quad (2.28)$$

の集合 N_{fg} を考えることにしよう。このとき、以下の補題が成り立つ。

補題: 集合 N_{fg} は、 $f(A)\mathbf{y} = \mathbf{0}$ となるベクトル \mathbf{y} の集合 N_f と、 $g(A)\mathbf{z} = \mathbf{0}$ となるベクトル \mathbf{z} の集合 N_g との直和で書ける。つまり任意の $\mathbf{x} \in N_{fg}$ に対し $\mathbf{y} \in N_f$ と $\mathbf{z} \in N_g$ が存在し、 $\mathbf{x} = \mathbf{y} + \mathbf{z}$ と書ける。

これを示すために、以下の事実を使う。

事実: 複素係数多項式 $f(x)$ と $g(x)$ が共通のゼロ点を持たないならば、多項式 $a(x), b(x)$ が存在し、 $a(x)f(x) + b(x)g(x) = 1$ と出来る¹⁴。

上記事実により、多項式 $a(A), b(A)$ が存在し、 $a(A)f(A) + b(A)g(A) = I$ (単位行列) が満たされる。そのため、

$$\mathbf{x} = a(A)f(A)\mathbf{x} + b(A)g(A)\mathbf{x} \quad (2.29)$$

が成り立つ。

ここで

$$a(A)f(A)\mathbf{x} \in N_g, \quad b(A)g(A)\mathbf{x} \in N_f \quad (2.30)$$

が成り立つ¹⁵。このことは、式 (2.28) を用いると

$$g(A)[a(A)f(A)\mathbf{x}] = a(A)[f(A)g(A)\mathbf{x}] = \mathbf{0} \quad (2.31)$$

となることから簡単に確認できる。これはすなわち、 $\mathbf{x} \in N_{fg}$ を $a(A)f(A)\mathbf{x} \in N_g$ と $b(A)g(A)\mathbf{x} \in N_f$ に分解できたということである。よって補題は示された。

では本題のスペクトル定理に戻ろう。任意の n 次元ベクトル \mathbf{u} について、 $n + 1$ 本のベクトルの組 $\mathbf{u}, A\mathbf{u}, A^2\mathbf{u}, \dots, A^n\mathbf{u}$ は線形従属である。そのため、ある n 次以下の多項式 F が存在し、 $F(A)\mathbf{u} = \mathbf{0}$ が成

¹²以下の証明は P. ラックス『線形代数』丸善出版、第 6 章に基づく。

¹³これは行列に対するスペクトル定理であるが、いくつかの似ているがやや異なる定理が「スペクトル定理」の名で呼ばれているので注意する必要がある。特に物理において重要なのは、(一般に無限次元の場合も含めた) 自己共役演算子に対するスペクトル定理である。

¹⁴証明は、ユークリッドの互除法を多項式の割り算に対して適用することで行うことが出来る。 $f(x)$ の方が $g(x)$ より次数が高いとすると、 f を g で割ると $f(x) = c(x)g(x) + h(x)$ (ただし $h(x)$ は $g(x)$ より次数は低い) となる。続けて $g(x)$ を $h(x)$ で割って、... を繰り返していく。もし 1 次以上の多項式の時点で割り切れてしまったら、その多項式が $f(x)$ と $g(x)$ の共通因数となるので、共通のゼロ点がないという仮定に矛盾。よって定数項まで割り切れないが、割り算のあまりである $h(x)$ などすべて $a(x)f(x) + b(x)g(x)$ 型をしていることを思い出すと、定数項までたどり着いた際の式は、「 $a(x)f(x) + b(x)g(x) = \text{定数項}$ 」という形になる。両辺を定数項で割れば、これが欲しい式である。

¹⁵なお、 N_f と N_g への分解の仕方が一意であることも同様にして証明できる。

り立つ。代数学の基本定理¹⁶により、これは複素数 λ_i を用いて

$$F(A)\mathbf{u} = \prod_i (A - \lambda_i)^{n_i} \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (2.32)$$

と書ける。これに先程の補題を繰り返し適用することにより、任意のベクトル \mathbf{u} は、 $(A - \lambda_i)^{n_i}$ が作用するとゼロになるようなベクトルの和の形に分解できることが分かる。これはスペクトル定理そのものである。□

行列 A の固有値 a_i に属する固有ベクトルと一般化固有ベクトルたちが張る空間 V_i^A の構造をもう少し深く考察しよう。 m 階の一般化固有ベクトルに $(A - a_i I)$ を作用させると、階数が1だけ減って $m - 1$ 階の一般化固有ベクトルになる。 $(A - a_i I)$ を作用させていくと、どのようにベクトルは変化していくのだろうか。結果としては、以下のようなきれいな性質が成り立つことが導ける。

\mathbf{u} と \mathbf{v} を、固有値 a_i に属する m ($m \geq 2$) 階の一般化固有ベクトルとする。また両者とも、 $m - 1$ 階以下のすべての一般化固有ベクトルと直交しているとする。このとき、 $(A - a_i I)$ を作用させると両者は一致する、つまり

$$(A - a_i I)\mathbf{u} = (A - a_i I)\mathbf{v} \quad (2.33)$$

が成り立つならば、 $\mathbf{u} = \mathbf{v}$ である¹⁷。

これはすなわち、 $(A - a_i I)$ を繰り返し作用させて得られていくベクトルの列は、途中で分岐や合流をせずに $\mathbf{0}$ まで到達するということを意味している。なので、 V_i^A の基底が、 $(A - a_i I)$ の作用でどう変化するかを図示すると、図3のような構造が描ける。

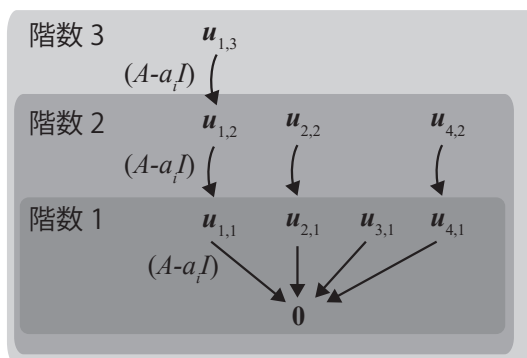


図3: V_i^A に属する一般化固有ベクトルたちの基底の、 $(A - a_i I)$ の作用による変化のイメージ図。 $\mathbf{u}_{k,j}$ が、 k 番目の系列の、 j 階の固有ベクトルを表している。 $(A - a_i I)$ の作用は一本鎖の構造をなしており、複数の高階の一般化固有ベクトルが、 $(A - a_i I)$ の作用で同じ固有ベクトルに移ることはない。

¹⁶代数学の基本定理は「任意の n 次多項式は、複素数の範囲で重解を含めて n 個の解を持つ」という定理。

¹⁷【証明】： $(A - a_i I)(\mathbf{u} - \mathbf{v}) = \mathbf{0}$ より、 $\mathbf{u} - \mathbf{v}$ はゼロでないならば1階の一般化固有ベクトル（普通の固有ベクトル）である。ところが、 \mathbf{u} も \mathbf{v} もともに1階の一般化固有ベクトルとは直交しているので、 $\mathbf{u} - \mathbf{v}$ が1階の一般化固有ベクトルとはならず、ゆえにこれはゼロベクトルである。すなわち $\mathbf{u} = \mathbf{v}$ である。

ここまでの観察事実を用いると、任意の行列 A について、適切な正則行列 P が存在し、

$$PAP^{-1} = \begin{pmatrix} X^{[1,1]} & O & \cdots & O \\ O & X^{[2,2]} & \ddots & O \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ O & O & \cdots & X^{[m,m]} \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

$$X^{[i,i]} = \begin{pmatrix} \lambda_i & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_i & 1 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \lambda_i \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

という形にブロック対角化できることを示すことが出来る¹⁸。これを「ジョルダン標準形 (Jordan normal form)」という¹⁹。また各ブロック行列 $X^{[i,i]}$ を「ジョルダン細胞 (Jordan block)」という。一つのジョルダン細胞が、先程導いた「 $(A - a_i I)$ の繰り返しの作用で得られるベクトルの系列一本」を与えるものである。ジョルダン標準形にまで持ち込めば、「左右の一般化固有ベクトル同士が双対基底の関係にあること」も簡単に見て取ることが出来る。

一つ一つのジョルダン細胞は、単位行列の定数倍 $\lambda_i I$ と、何乗かするとゼロ行列になってしまう「べき零行列 (nilpotent matrix)」 Z を用いて

$$X^{[i,i]} = \lambda_i I + Z \quad (2.36)$$

と書けている。ただしべき零行列とは、ある自然数 m が存在し、 $Z^m = O$ となる行列のことである。

2.4 行列の関数

ここでは、行列を引数にとり行列を返すような行列関数 $f(A)$ を考えよう。 $f(x)$ がもし多項式 $f(x) = \sum_n c_n x^n$ であるのならば、行列の関数はそのまま代入して $f(A) = \sum_n c_n A^n$ と定義すればよい。一般の関数の場合には多項式では書けないが、関数を多項式で表す手法としてテイラー展開がある。これを踏まえて、多項式でない場合の行列の関数 $f(A)$ を以下のように定義する。

定義 2.1 (行列の関数). $f(x)$ の $x = 0$ 周りの収束半径を r とし、行列 A の固有値の絶対値はすべて r 未満とする²⁰。このとき、行列の関数 $f(A)$ を

$$f(A) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} A^n \quad (2.37)$$

で定義する。

定義を見ると分かるように、行列の関数を知りたいならば、行列のべき乗が計算できる (形にする) 必要がある。べき乗計算をするには、対角化をすれば計算が非常に速くなり見通しもよくなる。なぜなら、行列のべき乗計算は

$$A^k = (X \Lambda X^{-1})^k = X \Lambda^k X^{-1} \quad (2.38)$$

¹⁸ P として一般化固有ベクトルを並べたものをとればよい。

¹⁹ ジョルダン標準形に出来ることについての証明は、ここで示したもの以外に、単因子論を用いた代数的な方法が知られている。このあたりの話は堀田良之『加群十話』などに解説がある。

²⁰ 収束半径の条件を満たさない場合には、適宜中心を原点から動かして解析接続を行う。

と変形できるが、対角行列のべき乗はそれぞれの項を k 乗するだけなのですぐに実行できるからである。結局、

$$A^k = X \begin{pmatrix} \lambda_1^k & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2^k & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n^k \end{pmatrix} X^{-1} \quad (2.39)$$

と、極めて計算が楽になる。テイラー展開にこれを代入すれば、一般に行列の関数が定義されているのであれば、行列の関数 $f(A) = \sum_n c_n A^n$ は

$$f(A) = X \begin{pmatrix} f(\lambda_1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & f(\lambda_2) & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & f(\lambda_n) \end{pmatrix} X^{-1} \quad (2.40)$$

と計算できる²¹。なお固有ベクトル v_i たちの双対基底 u_i が求まっているのであれば、

$$f(A) = \sum_i f(\lambda_i) v_i u_i \quad (2.43)$$

とも書ける。

[2-3]. 行列 $A := k \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ について、 $\tan A$ を計算せよ。ただし k は $|k| < \pi/2\sqrt{2}$ を満たす適当な

実数である。

特に頻出の行列の関数に、行列の指数関数 e^A がある。指数関数は収束半径 ∞ なので、これは任意の A でテイラー展開を用いた書き下しができる。具体的に書くと

$$e^A = I + A + \frac{1}{2}A^2 + \frac{1}{6}A^3 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n \quad (2.44)$$

である。

行列の指数関数の一つの応用例として、連立微分方程式の解を見てみよう。一次の微分方程式

$$\frac{dx}{dt} = ax \quad (2.45)$$

の解はもちろん $x(t) = e^{at}x(0)$ である。これと同様に、線形連立微分方程式

$$\frac{d}{dt} \mathbf{x} = A\mathbf{x} \quad (2.46)$$

の解は

$$\mathbf{x}(t) = e^{At} \mathbf{x}(0) \quad (2.47)$$

²¹一般に、 A を対角化可能な行列とすると、

$$f(A) = f(\lambda_i) P_i \quad (2.41)$$

と書ける。ただし P_i はフロベニウス共変

$$P_i := \prod_{j(\neq i)} \frac{1}{\lambda_i - \lambda_j} (A - \lambda_j I) \quad (2.42)$$

である。これを「シルベスターの公式 (Sylvester's formula)」という。

と、行列の指数関数を用いて簡単に解ける。これが確かに解になっていることは、行列の指数関数の微分が

$$\frac{d}{dt}e^{At} = Ae^{At} \quad (2.48)$$

となることをテイラー展開の定義に立ち返って確認すればよい。

[2-4]. 初期状態 $x(0) = x_0, y(0) = y_0$ に対する連立微分方程式

$$\frac{d}{dt}x(t) = 6x(t) + 30y(t) \quad (2.49)$$

$$\frac{d}{dt}y(t) = 30x(t) - 19y(t) \quad (2.50)$$

の解を求めよ。

ただし行列の指数関数は、数の指数関数の性質をすべて満たすわけではない。例えば、数の指数関数は

$$e^{a+b} = e^a e^b \quad (2.51)$$

という関係を満たすが、行列の指数関数の場合、 A と B が非可換 ($AB \neq BA$) ならば一般に

$$e^{A+B} \neq e^A e^B \quad (2.52)$$

である²²。

ただし、以下のような極限を用いた表示が成り立つ。

定理 2.8 (リーの積公式 (Lie product formula)). 任意の行列 A, B について

$$e^{A+B} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{A/n} e^{B/n} \right)^n \quad (2.54)$$

これは A, B が有限次元行列の場合の定理だが、無限次元の場合に拡張したのも証明されており、これは「リー・トロッターの積公式 (Lie-Trotter product formula)」と呼ばれる。

証明. テイラー展開すると、

$$e^{(A+B)/n} - e^{A/n} e^{B/n} = O\left(\frac{1}{n^2}\right) \quad (2.55)$$

である。よって

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{A/n} e^{B/n} \right)^n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{(A+B)/n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right) \right)^n = e^{A+B} \quad (2.56)$$

と、求めたい関係式を得る。□

また、 A, B がエルミート行列の場合には、以下の関係が成り立つことが知られている。

定理 2.9 (ゴールデン・トンプソンの不等式 (Golden-Thompson inequality)). 任意のエルミート行列 A, B について

$$\text{Tr}[e^{A+B}] \leq \text{Tr}[e^A e^B] \quad (2.57)$$

²²これを計算する「ベイカー・キャンベル・ハウスドルフの公式 (Baker–Campbell–Hausdorff formula)」も知られている。交換子を $[A, B] := AB - BA$ で表すことにすると、 $e^A e^B = e^C$ 、ただし C は以下のように計算できる。

$$C = A + B + \frac{1}{2}[A, B] + \frac{1}{12}[A, [A, B]] - \frac{1}{12}[B, [A, B]] + \dots \quad (2.53)$$

量子力学の計算では、この展開を適当なところで打ち切ったものがしばしば用いられる。

統計力学では、カノニカル分布や分配関数の計算において e^A 型の量のトレースをとる必要がよく生じるので、ハミルトニアンが二つの扱いやすい演算子の和として書けている状況 ($H = H_1 + H_2$) において、この不等式が利用されることがある。証明は煩雑なので、章末の補論に回す。

なお、行列式の値は e^{A+B} と $e^A e^B$ で一致する。

$$\det[e^{A+B}] = \det[e^A e^B] \quad (2.58)$$

証明は、リーの積公式と $\det[XY] = \det[X] \det[Y]$ を用いればよい。

2.5 <補論>：正規行列

ここまで述べてきたエルミート行列に対する性質のほとんどは、実は $AA^\dagger = A^\dagger A$ となる行列である「正規行列 (normal matrix)」に対して成り立つ性質である。正規行列は、非エルミート量子力学²³ の対象のクラスの一つとしてしばしば現れる。

定理 2.10. 正規行列は以下の性質を満たす。

1. 正規行列の異なる固有値に属する固有ベクトル同士は互いに直交する。
2. ある行列がユニタリ対角化可能であることの必要十分条件は、その行列が正規行列であることである (テプリッツの定理 (Toeplitz theorem))

証明. 1 の証明：正規行列 A の固有値 λ_i に対応する (規格化された) 固有ベクトルを \mathbf{v}_i とする。すると、 $\|(A^\dagger - \lambda_i^* I)\mathbf{v}_i\|^2$ という量を考えると

$$\begin{aligned} \|(A^\dagger - \lambda_i^* I)\mathbf{v}_i\|^2 &= \mathbf{v}_i^\dagger (A - \lambda_i I)(A^\dagger - \lambda_i^* I)\mathbf{v}_i \\ &= \mathbf{v}_i^\dagger AA^\dagger \mathbf{v}_i - \lambda_i^* \mathbf{v}_i^\dagger A \mathbf{v}_i - \lambda_i \mathbf{v}_i^\dagger A^\dagger \mathbf{v}_i + |\lambda_i|^2 \\ &= \mathbf{v}_i^\dagger A^\dagger A \mathbf{v}_i - |\lambda_i|^2 - |\lambda_i|^2 + |\lambda_i|^2 \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.59)$$

となるので、 $A^\dagger \mathbf{v}_i = \lambda_i^* \mathbf{v}_i$ 、すなわち \mathbf{v}_i は行列 A^\dagger の固有値 λ_i^* の固有ベクトルと分かる。あとはエルミート行列の場合と同様に

$$\lambda_i \mathbf{v}_j^\dagger \mathbf{v}_i = \mathbf{v}_j^\dagger A \mathbf{v}_i = (A^\dagger \mathbf{v}_j)^\dagger \mathbf{v}_i = \lambda_j \mathbf{v}_j^\dagger \mathbf{v}_i \quad (2.60)$$

より、 $\lambda_i \neq \lambda_j$ ならば $\mathbf{v}_j^\dagger \mathbf{v}_i = 0$ が示せる。

2 の証明：まず正規行列がユニタリ対角化可能であることを示す。そのために、「上三角行列 T が正規行列ならば、それは対角行列である」という補題を示す。この補題は、「 $j > i$ を満たす任意の j について、 $T_{ij} = 0$ が成り立つ」という命題を、 i についての帰納法で示すことで証明出来る。 $T^\dagger T$ と TT^\dagger の i 番目の対角成分が一致するという関係式は、帰納法の仮定も用いると

$$\sum_{j=i}^n |T_{ij}|^2 = |T_{ii}|^2 \quad (2.61)$$

と書くことが出来る。これにより、 $T_{ij} = 0$ ($j = i+1, \dots, n$) を得る。

²³ 量子開放系や測定を受ける系のダイナミクスを、孤立した系のダイナミクスの枠組で有効的に記述する際、非エルミートなハミルトニアンが出現することがある。

正規行列 A に対するシュール分解 $A = U^\dagger T U$ (T は上三角行列) を用いると、

$$A A^\dagger = U^\dagger T U U^\dagger T^\dagger U = U^\dagger T T^\dagger U \quad (2.62)$$

$$A^\dagger A = U^\dagger T^\dagger U U^\dagger T U = U^\dagger T^\dagger T U \quad (2.63)$$

であり、 $A A^\dagger = A^\dagger A$ より、 $T T^\dagger = T^\dagger T$ 、すなわち T も正規行列と分かる。先の補題により T は実は対角行列である。よって正規行列 A はユニタリ対角化される。

逆に A が $A = U^\dagger D U$ (D は対角行列) と対角化されるのならば

$$A A^\dagger = U^\dagger D D^\dagger U = U^\dagger D^\dagger D U = A^\dagger A \quad (2.64)$$

と、 A は正規行列と分かる。よって示された。 \square

2.6 <補論>：ゴールドン・トンプソンの不等式の証明

本編で証明を与えなかった、ゴールドン・トンプソンの不等式を証明する。

証明. まず、以下の不等式を帰納法で示す²⁴。

補題：任意の行列 $\{X_i\}$ と自然数 m に対し、

$$\left| \text{Tr} \left[\prod_{i=1}^{2^m} X_i \right] \right|^{2^m} \leq \prod_{i=1}^{2^m} \text{Tr}[(X_i^\dagger X_i)^{2^{m-1}}] \quad (2.65)$$

$m = 1$ の場合、行列成分を素直に計算すれば結果が正しいことは確認できる。

$m = k$ の場合に成立すると仮定する。 $m = k + 1$ の場合、 $X_i = Y_{2i-1} Y_{2i}$ を $m = k$ の場合の不等式 (2.65) に代入すると

$$\left| \text{Tr} \left[\prod_{i=1}^{2^{k+1}} Y_i \right] \right|^{2^k} \leq \prod_{i=1}^{2^k} \text{Tr}[(Y_{2i}^\dagger Y_{2i-1}^\dagger Y_{2i-1} Y_{2i})^{2^{k-1}}] \quad (2.66)$$

となる。右辺の積の中はすべて同じ形なので、 $i = 1$ の場合の計算を考える。トレース巡回性を使うと

$$\text{Tr}[(Y_2^\dagger Y_1^\dagger Y_1 Y_2)^{2^{k-1}}] = \text{Tr}[(Y_1^\dagger Y_1 Y_2 Y_2^\dagger)^{2^{k-1}}] \quad (2.67)$$

となる。 $X_i = Y_1^\dagger Y_1$ (i が奇数の場合)、 $X_i = Y_2^\dagger Y_2$ (i が偶数の場合) と置いて、再び $m = k$ の場合の不等式 (2.65) を用いると

$$\text{Tr}[(Y_1^\dagger Y_1 Y_2 Y_2^\dagger)^{2^{k-1}}]^2 \leq \text{Tr}[(Y_1^\dagger Y_1)^{2^k}] \text{Tr}[(Y_2^\dagger Y_2)^{2^k}] \quad (2.68)$$

が得られる。一般の i についてのこれらの結果を式 (2.66) に代入し、全体を二乗することで、 $m = k + 1$ の場合の式

$$\left| \text{Tr} \left[\prod_{i=1}^{2^{k+1}} Y_i \right] \right|^{2^{k+1}} \leq \prod_{i=1}^{2^{k+1}} \text{Tr}[(X_i^\dagger X_i)^{2^k}] \quad (2.69)$$

を得る。よって補題は示された。

さて、エルミート行列 C, D に対し、全 i で $X_i = CD$ として式 (2.65) に代入すると

$$\left| \text{Tr} [(CD)^{2^m}] \right| \leq \text{Tr}[(D^\dagger C^\dagger CD)^{2^{m-1}}] = \text{Tr}[(C^2 D^2)^{2^{m-1}}] \quad (2.70)$$

²⁴ゴールドン・トンプソンの不等式の証明では、最終的にはすべての X_i に共通の値 $C^2 D^2$ を代入する。そのため、ここで示す補題は過度の一般化をしているように思うかもしれない。しかし、帰納法で示していく際には、 X_i に異なる値も代入できるという設定にしておいた方が、帰納法の仮定が強くなるので、実はこのように一般化しておいた方が証明しやすくなる。

を得る。次に全 i で $X_i = C^2 D^2$ として $m - 1$ の場合の式 (2.65) に代入して…、と繰り返していくことにより、最終的に

$$\left| \text{Tr} \left[(CD)^{2m} \right] \right| \leq \text{Tr} [C^{2m} D^{2m}] \quad (2.71)$$

が得られる。

最後に、 $C = e^{A/2^m}$ 、 $D = e^{B/2^m}$ と置いて $m \rightarrow \infty$ 極限をとり、リーの積公式を用いることで、求めたいゴールデン・トンプソンの不等式を得る。□

3 正定値行列

この章では対象をエルミート行列に限定して、その重要な性質である正定値性について考える。

3.1 正定値行列の性質

まずは行列の正定値性を定義しよう。行列の正定値性にはいくつかの等価な定義・特徴づけが存在する。なお、すでに見たようにエルミート行列の固有値はすべて実数であり、虚部を持たないことには注意しておく。

定義 3.1. エルミート行列 A の固有値がすべて正であるとき、行列 A は「正定値 (positive definite)」であるという²⁵。また、エルミート行列 A の固有値がすべて非負であるとき、行列 A は「半正定値 (positive semidefinite)」であるという。

定理 3.1. エルミート行列 A について、以下は同値。

1. A は半正定値 (すべての固有値が非負)
2. 任意の $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$ に対し $\mathbf{v}^\dagger A \mathbf{v} \geq 0$ を満たす。
3. A はグラム行列 (Gram matrix : 行列 B が存在し $A = B^\dagger B$ と書ける)

定理 3.2. エルミート行列 A について、以下は同値。

1. A は正定値 (すべての固有値が正)
2. 任意の $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$ に対し $\langle \mathbf{v}, A \mathbf{v} \rangle > 0$ を満たす。
3. A はフルランクな行列 B のグラム行列。

これらの定義が等価であることは、エルミート行列はその固有値、固有ベクトルを用いて

$$A = \sum_i \lambda_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^\dagger \quad (3.1)$$

と書けること、 $\{\mathbf{v}_i\}$ が正規直交基底をなすことを思い出せば、すぐに示せる (各自確認しよう)。

[3-1]. 以下の性質を満たす 2×2 実対称行列の例をそれぞれ一つずつ挙げ、それが確かにその例になっていることを示せ。

- (1). 負の行列成分を含む正定値行列。
- (2). すべての行列成分が正だが、半正定値ではない行列。

正定値、半正定値行列はいろいろなところに出てくる。例えば、量子力学では「密度行列 ρ 」が一般の量子状態を表すが、これは半正定値でないといけない。この性質は、量子力学では $\mathbf{v}^\dagger \rho \mathbf{v}$ が「密度行列 ρ における状態 \mathbf{v} の出現確率」を表しており、確率は非負でないといけないという事実を反映したものである。ま

²⁵文献によっては「正値」と呼ぶこともある。なお、行列のすべての成分が正の実数である行列を「正行列」、非負の実数である行列を「非負行列」などと呼ぶこともある。これらは正定値性とは全く別概念なので注意が必要である。

た、量子力学では固有値の評価を行いたいことがよくあるが、その際にも $A \geq B$ のような行列の不等式を用いた議論がしばしばなされる。

後の章で見ると、自然な最適化問題が「 X が可能なすべての半正定値行列を動く中で、 X を用いた式～の値を最小化（最大化）せよ」という半正定値計画問題に帰着されることはしばしばある。これは、半正定値行列とグラム行列が同一であることから、ベクトルを動かした場合の内積に関する量の最適化問題が、半正定値行列に関する最適化問題と読み替えられるためである。後述する二次形式の理論においても、(半) 正定値性は重要な役割を果たす。

正定値、半正定値行列の重要な数学的性質をいくつか挙げておこう。

- A, B が (半) 正定値、 $a > 0$ が正の実数ならば、 $A+B, aA$ は (半) 正定値である。特に $\lambda A + (1-\lambda)B$ ($0 \leq \lambda \leq 1$) も (半) 正定値なので、(半) 正定値行列全体は凸集合をなす。
- A が正定値なら A は正則行列であり、 A^{-1} も正定値である。
- A が (半) 正定値、 X が正則行列なら、 $X^\dagger A X$ は (半) 正定値である²⁶。
- A がブロック行列で、対角部分のブロックが正方行列であるとする。 A が (半) 正定値ならば、各ブロックの正方行列も (半) 正定値である。

これらの性質の証明も、定義に立ち返れば容易であろう。

[3-2]. A が半正定値なら、 $X^\dagger A X$ は半正定値であることを示せ²⁷。

3.2 行列のべき根

他にも正定値性に関連した興味深い事実が多数ある。その一つとして、行列の p 乗根を考えよう。行列 A の p 乗根は、 $B^p = A$ を満たす行列 B として定義される。これは一般に一意でないが、 A が半正定値の場合、半正定値行列の範囲内では p 乗根は一意に定まる。エルミート行列 A は、ユニタリ行列 U を用いて

$$A = U^\dagger \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) U \quad (3.2)$$

と対角化できる。 A は半正定値なので、 λ_i はすべて非負である。すると、

$$B = U^\dagger \text{diag}(\lambda_1^{1/p}, \lambda_2^{1/p}, \dots, \lambda_n^{1/p}) U \quad (3.3)$$

は A の p 乗根であり、かつ半正定値である。

これ以外の半正定値行列 B' で、 $(B')^p = A$ を満たすものが存在しないことは簡単に証明できる。 $B' = V^\dagger D V$ と対角化されているとする (D は対角行列)。 $(B')^p = V^\dagger D^p V = A$ で、これは A のユニタリ対角化になっているので、 $V = U$ 、 $D^p = \text{diag}(D_1^p, D_2^p, \dots, D_n^p) = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ である。 D_i たちが正の実数の範囲では、この解は $D_i = \lambda_i^{1/p}$ に一意に定まる。

定理 3.3. 任意の半正定値行列 A に対し、その p 乗根は半正定値行列の中にただ一つ存在する。すなわち、 $A = B^p$ を満たす半正定値行列 B はただ一つ存在する。

3.3 行列不等式

行列の正定値、半正定値性を用いて、行列の不等式が定義される²⁸。まず行列 A が正定値であることを $A > 0$ 、半正定値であることを $A \geq 0$ などと書く。さらにこれを用いて、二つのエルミート行列 A, B について、 $A - B > 0$ である場合に $A > B$ 、 $A - B \geq 0$ である場合に $A \geq B$ と、行列の不等式を定義すること

²⁶ X^{-1} ではなく X^\dagger である点に注意

²⁷ X が正則行列なら、同様の議論で A が正定値なら $X^\dagger A X$ も正定値であることを示せる。

²⁸ この節の内容は、Bhatia, "Matrix analysis", Springer の Sec.V に基づく。

が出来る。なお、一般には $A - B$ も $B - A$ も半正定値ではなく、その場合には A と B の間の大小関係は定義されない²⁹。

定義 3.2 (行列の不等式). 行列 A, B について、 $A \leq B$ ($A < B$) とは、 $B - A$ が半正定値 (正定値) であることを指す。

半正定値行列の 3 番目の性質により、もし $A \leq B$ ならば、任意の行列 X について

$$X^\dagger A X \leq X^\dagger B X \quad (3.4)$$

が成り立つことが分かる。この性質は基本的だが意外と役に立つ。

実数の領域 I から実数への関数 $f(x)$ について、もし任意の $x, y \in I$ に対し $x \leq y$ ならば $f(x) \leq f(y)$ が成り立つとき、この関数は領域 I で単調であるという³⁰。また、もし任意の $x, y \in I$ と任意の $0 \leq s \leq 1$ について、 $f(sx + (1-s)y) \leq sf(x) + (1-s)f(y)$ が成り立つとき、この関数は領域 I で (下に) 凸であるという (不等式の向きが逆向きの場合、この関数は上に凸であるという)。これらの概念を行列の場合に拡張する。

定義 3.3 (作用素単調関数と作用素凸関数). 行列から行列への関数 $f(X)$ が、行列の領域 (集合) I 上の任意の行列 $A \leq B$ ($A, B \in I$) について $f(A) \leq f(B)$ を満たすとき、この関数は領域 I 上で「作用素単調 (operator monotone, matrix monotone とも)」という。

行列から行列への関数 $f(X)$ が、行列の集合 I 上の任意の行列 A, B ($A, B \in I$) と任意の $0 \leq s \leq 1$ について、 $f(sA + (1-s)B) \leq sf(A) + (1-s)f(B)$ を満たすとき、この関数は領域 I で (下に) 「作用素凸 (operator convex, matrix convex とも)」であるという³¹。

特に f が連続関数である場合には、凸性の確認は $s = 1/2$ の場合のみ、つまり

$$f\left(\frac{A+B}{2}\right) \leq \frac{f(A)+f(B)}{2} \quad (3.5)$$

の場合だけ示せば十分である。

注意しなければいけないのは、実数関数の意味で単調または凸な関数が、行列関数の意味でも作用素単調または作用素凸とは限らない点である。例えば、 $f(x) = x^2$ は実数関数の意味では $x \geq 0$ の領域で単調な関数である。ところが、 $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \geq 0$ 、 $B = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \geq 0$ はともに半正定値行列であり、 $B - A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \geq 0$ が満たされているが

$$B^2 - A^2 = \begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

は負の固有値 $\lambda_- = \frac{3-\sqrt{13}}{2}$ を持つのでこれは半正定値ではない。すなわち、 $f(X) = X^2$ は $X \geq 0$ の領域においても単調ではない。

また $f(x) = x^3$ は実数関数の意味では $x \geq 0$ の領域で (下に) 凸な関数である。ところが、 $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \geq$

²⁹なのでここで定義された行列の不等式は半順序である。

³⁰正確には単調増大だが、単調と略すことも多い。

³¹英語では、下に凸を「convex」あるいは「lower convex」、上に凸を「concave」あるいは「upper convex」という。

0、 $B = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \geq 0$ はともに半正定値行列であるが、

$$\frac{A^3 + B^3}{2} - \left(\frac{A+B}{2}\right)^3 = \begin{pmatrix} 6 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

は負の固有値 $\lambda_- = 3 - \sqrt{10}$ を持つのでこれは半正定値でない。すなわち、 $f(X) = X^3$ は $X \geq 0$ の領域において凸ではない。

もちろん、単調性や凸性がそのまま行列の場合にも拡張されることもある。例えば上でも見た $f(x) = x^2$ は、行列関数の意味で作用素凸である。これは

$$sA^2 + (1-s)B^2 - (sA + (1-s)B)^2 = s(1-s)(A-B)^2 \geq 0 \quad (3.8)$$

と示すことができる。

$X > 0$ の領域における作用素単調な関数の例としては、 $f(X) = -X^{-1}$ (逆数)、 $X^{1/2}$ (平方根)、 $\ln X$ (対数) などがある。これらの単調性を順に証明しよう。

$-X^{-1}$ の単調性: $0 < A \leq B$ とする。式 (3.4) で $X = B^{-1/2}$ と置くことにより、 $B^{-1/2}AB^{-1/2} \leq I$ を得る。 $0 < Y \leq I$ ならば $Y^{-1} \geq I$ なので、 $B^{1/2}A^{-1}B^{1/2} \geq I$ である。最後に、再び式 (3.4) を用い、 $X = B^{-1/2}$ と置くことで $A^{-1} \geq B^{-1}$ を得る。

$X^{1/2}$ の単調性: $0 < A \leq B$ とする。上と同様の計算により、

$$I \geq B^{-1/2}AB^{-1/2} = (A^{1/2}B^{-1/2})^\dagger(A^{1/2}B^{-1/2}) \quad (3.9)$$

なので、 $A^{1/2}B^{-1/2}$ のすべての固有値 λ_i はその絶対値が 1 以下であることが分かる³²。ここで定理 2.4 より XY と YX の固有値は一致するので、 $X = A^{1/2}B^{-1/4}$ 、 $Y = B^{-1/4}$ と置くことにより、 λ_i たちは $B^{-1/4}A^{1/2}B^{-1/4}$ の固有値と一致することが分かる。よって λ_i たちは $0 \leq \lambda_i \leq 1$ を満たす実数であり、特に $I \geq B^{-1/4}A^{1/2}B^{-1/4}$ である³³。これにより $B^{1/2} \geq A^{1/2}$ を得る。

$\ln X$ の単調性: $0 < A \leq B$ とする。実数の $\ln x$ が

$$\ln x = \int_0^\infty \left(\frac{1}{1+t} - \frac{1}{x+t} \right) dt \quad (3.10)$$

と書けること、及び正定値行列 X はユニタリ対角化されることを思い出すと、行列関数 $\ln X$ は

$$\ln X = \int_0^\infty \left(\frac{1}{1+t}I - (X+tI)^{-1} \right) dt \quad (3.11)$$

と書けることが分かる³⁴。よって

$$\ln B - \ln A = \int_0^\infty \left((A+tI)^{-1} - (B+tI)^{-1} \right) dt \quad (3.12)$$

となるが、ここで $-X^{-1}$ の単調性より、被積分項は半正定値であることが分かる。よって $\ln B - \ln A \geq 0$ と分かる。

より一般に以下が成り立つ³⁵。

³²対応する規格化された固有ベクトル v_i を用いると、 $v_i^\dagger I v_i \geq (A^{1/2}B^{-1/2}v_i)^\dagger(A^{1/2}B^{-1/2}v_i) = |\lambda_i|^2$ なので。

³³後に学ぶ特異値及び演算子ノルムを用いるならば、以下のような説明も出来る。

$I \geq (A^{1/2}B^{-1/2})^\dagger(A^{1/2}B^{-1/2})$ なので、 $1 \geq \|(A^{1/2}B^{-1/2})\| = s_{\max}(A^{1/2}B^{-1/2})$ (最大特異値) が成り立つ。ここで最大固有値は最大特異値で上から押さえられるので、 $1 \geq s_{\max}(A^{1/2}B^{-1/2}) \geq \lambda_{\max}(A^{1/2}B^{-1/2}) = \lambda_{\max}(B^{-1/4}A^{1/2}B^{-1/4})$ である。

³⁴ $X = U^\dagger D U$ と対角化されるとすると、 $(X+tI)^{-1} = U^\dagger(D+tI)^{-1}U$ と計算出来るので、逆行列の部分は対角成分だけになり、実数の場合と同様の計算が実行できる。

³⁵ $f(X) = X^a$ ($0 < a \leq 1$) の単調性の証明は、 a を 2 進展開し、平方根の場合と同様の議論を繰り返し適用していくことで証明出来る。詳細な証明は Bhatia, "Matrix analysis", Sec.V.1 (Theorem V.1.9) に出ている。

定理 3.4. $f(X) = -X^{-1}$, $f(X) = \ln X$, $f(X) = X^a$ ($0 \leq a \leq 1$) は $X > 0$ の領域において作用素単調関数である。

逆に以下のような素朴な期待は成り立たないことが知られている。

- $f(X) = X^a$ ($1 < a$) は $X \geq 0$ の領域において作用素単調な関数ではない。
- $A, B \geq 0$ であっても、 $AB + BA$ は半正定値とは限らない³⁶。

では次に作用素凸な関数の議論に進もう。 $X > 0$ の領域における作用素凸な関数の代表例としては、既に示した $f(X) = X^2$ のほかに、 X^{-1} (逆数)、 $\ln X$ (対数)、 $X \ln X$ などがある。

X^{-1} の凸性: 鍵となるのは以下の関係式である³⁷。

$$\begin{aligned} \left(\frac{A+B}{2}\right)^{-1} + \frac{1}{2}(A^{-1} - B^{-1})(A^{-1} + B^{-1})^{-1}(A^{-1} - B^{-1}) &= \frac{1}{2}(A^{-1} + B^{-1})(A^{-1} + B^{-1})^{-1}(A^{-1} + B^{-1}) \\ &= \frac{1}{2}(A^{-1} + B^{-1}) \end{aligned} \quad (3.13)$$

これにより、

$$\frac{1}{2}(A^{-1} + B^{-1}) - \left(\frac{A+B}{2}\right)^{-1} = \frac{1}{2}(A^{-1} - B^{-1})(A^{-1} + B^{-1})^{-1}(A^{-1} - B^{-1}) \geq 0 \quad (3.14)$$

が得られるので、 X^{-1} は作用素凸だと分かる。

$-\ln X$ の凸性: $\ln X$ の単調性の場合と同様に、式 (3.10) の表示と X^{-1} の凸性とを組み合わせることで証明出来る。

$X \ln X$ の凸性: $\ln X$ の場合と同様に、式 (3.10) の表示を利用する。 $\ln A$ の積分表示を利用すると

$$\begin{aligned} \frac{A \ln A + B \ln B}{2} - \frac{A+B}{2} \ln \frac{A+B}{2} &= \int_0^\infty \left(\frac{A+B}{2} \left(\frac{A+B}{2} + tI \right)^{-1} - \frac{A}{2}(A+tI)^{-1} - \frac{B}{2}(B+tI)^{-1} \right) dt \\ &= \int_0^\infty t \left(\frac{1}{2}(A+tI)^{-1} + \frac{1}{2}(B+tI)^{-1} - \left(\frac{A+B}{2} + tI \right)^{-1} \right) dt \end{aligned} \quad (3.15)$$

と変形できる³⁸。被積分項の大かっこの中身は、 X^{-1} の凸性より半正定値である。よってそれに t をかけて積分して得られる右辺全体もまた半正定値であり、これは $X \ln X$ の凸性を意味している。

より一般に以下が成り立つ。

定理 3.5. $f(X) = -\ln X$, $f(X) = X \ln X$, $f(X) = -X^a$ ($0 \leq a \leq 1$)、 $f(X) = X^a$ ($-1 \leq a \leq 0$ または $1 \leq a \leq 2$) は $X > 0$ の領域において作用素凸関数である。

逆に $f(X) = X^a$ ($-1 \leq a \leq 0$ でも $1 \leq a \leq 2$ でもない) は作用素凸関数ではない。

³⁶一方、 $A > 0$ かつ $AB + BA > 0$ ならば $B > 0$ が成り立つことが知られている (ラックス『線形代数』第 10 章 定理 4)。

³⁷左辺第二項の二つのカッコを展開し、 $A^{-1}(A^{-1} + B^{-1})^{-1} = (I + B^{-1}A)^{-1}$ などと項別に計算をして、再び因数分解することで 1 行目右辺が得られる。

³⁸二つ目の等号では

$$A(A+tI)^{-1} = (A+tI)(A+tI)^{-1} - tI(A+tI)^{-1} = I - tI(A+tI)^{-1} \quad (3.16)$$

などの変形を用いている。

3.4 <補論>：作用素単調と作用素凸の一般的関係

作用素単調関数及び作用素凸関数の関係については、かなり一般的な性質が分かっている。それを示すために、まず作用素凸関数の便利な言いかえを導入する³⁹。

定理 3.6. $f(x)$ を $[0, a)$ 上の関数とする。このとき、以下は同値。

1. $f(X)$ は作用素凸、かつ $f(0) \leq 0$
2. $A^\dagger A \leq I$ である⁴⁰ 任意の A とスペクトルが $[0, a)$ 上の任意の X について、 $f(A^\dagger X A) \leq A^\dagger f(X) A$
3. 任意の射影行列 P とスペクトルが $[0, a)$ 上の任意の X について、 $f(PXP) \leq P f(X) P$

証明. $1 \rightarrow 2$ ：以下の $2n \times 2n$ のブロック行列を考える。

$$Y := \begin{pmatrix} X & O \\ O & O \end{pmatrix}, \quad U := \begin{pmatrix} A & B \\ C & -A^\dagger \end{pmatrix}, \quad V := \begin{pmatrix} A & -B \\ C & A^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

ただし

$$B := (1 - AA^\dagger)^{1/2}, \quad C := (1 - A^\dagger A)^{1/2} \quad (3.18)$$

と定義した。すると

$$U^\dagger Y U = \begin{pmatrix} A^\dagger X A & A^\dagger X B \\ B X A & B X B \end{pmatrix}, \quad V^\dagger Y V = \begin{pmatrix} A^\dagger X A & -A^\dagger X B \\ -B X A & B X B \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

とな。ブロック対角な行列について

$$f \begin{pmatrix} P & O \\ O & Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(P) & O \\ O & f(Q) \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

となることと、一般のユニタリ行列 W について

$$f(W^\dagger P W) = W^\dagger f(P) W \quad (3.21)$$

³⁹以降の証明は Bhatia, "Matrix analysis", Springer の Sec.V に基づく。

となること⁴¹を用いると、

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} f(A^\dagger X A) & O \\ O & f(B X B) \end{pmatrix} &= f \begin{pmatrix} A^\dagger X A & O \\ O & B X B \end{pmatrix} \\
&= f \left(\frac{U^\dagger X U + V^\dagger X V}{2} \right) \\
&\leq \frac{f(U^\dagger X U) + f(V^\dagger X V)}{2} \\
&= \frac{1}{2} \left(U^\dagger \begin{pmatrix} f(X) & O \\ O & f(O) \end{pmatrix} U + V^\dagger \begin{pmatrix} f(X) & O \\ O & f(O) \end{pmatrix} V \right) \\
&\leq \frac{1}{2} \left(U^\dagger \begin{pmatrix} f(X) & O \\ O & O \end{pmatrix} U + V^\dagger \begin{pmatrix} f(X) & O \\ O & O \end{pmatrix} V \right) \\
&= \begin{pmatrix} A^\dagger f(X) A & O \\ O & B f(X) B \end{pmatrix} \tag{3.22}
\end{aligned}$$

が得られる。特に左上ブロックを見ることで、 $f(A^\dagger X A) \leq A^\dagger f(X) A$ が成り立つことが分かる。

2→3：自明

3→1：とスペクトルが $[0, a)$ 上の任意の X, Y と、 $0 \leq k \leq 1$ について、 $2n \times 2n$ ブロック行列を

$$Z := \begin{pmatrix} X & O \\ O & Y \end{pmatrix}, \quad U := \begin{pmatrix} \sqrt{k}I & -\sqrt{1-k}I \\ \sqrt{1-k}I & \sqrt{k}I \end{pmatrix}, \quad P := \begin{pmatrix} I & O \\ O & O \end{pmatrix} \tag{3.23}$$

と定義する。すると

$$\begin{pmatrix} f(kX + (1-k)Y) & O \\ O & f(O) \end{pmatrix} = f(PU^\dagger ZUP) \leq Pf(U^\dagger ZU)P = PU^\dagger f(Z)UP = \begin{pmatrix} kf(X) + (1-k)f(Y) & O \\ O & O \end{pmatrix} \tag{3.24}$$

が得られるので、左上と右下をそれぞれ見ることで $f(kX + (1-k)Y) \leq kf(X) + (1-k)f(Y)$ と $f(O) \leq O$ が得られる。□

では作用素単調関数と作用素凸関数の結びつきを見よう。

定理 3.7. $g(X)$ が作用素単調関数であることは、 $f(X) := Xg(X)$ が作用素凸関数であることと同値である⁴²。

証明. (\Leftarrow): $f(X)$ について定理 3.6 の 2 が成り立つとき、 $g(X)$ が作用素単調なことを示す。 $X \leq Y$ とする。関数の連続性より、 X が可逆の場合に $g(X) \leq g(Y)$ を証明すれば十分である。 A として $A = Y^{-1/2}X^{1/2}$ と選べば、これは $AA^\dagger = X^{1/2}Y^{-1}X^{1/2} \leq I$ を満たす⁴³。これを用いると、

$$X^{1/2}g(X)X^{1/2} = f(X) = f(A^\dagger X A) \leq A^\dagger f(Y) A = X^{1/2}g(Y)X^{1/2} \tag{3.25}$$

を得る。左右から $X^{-1/2}$ を掛け、欲しい不等式を得る。

⁴¹ f をテイラー展開して各べきで考えれば、この関係は明らかである。

⁴² $g(X) = X^{-1}f(X)$ と書く場合には、さらに $f(0) \leq 0$ の条件が追加される。

⁴³ 左右から $X^{-1/2}$ をかければよい。

(\Rightarrow): $g(X)$ が作用素単調なとき、 $f(X)$ が定理 3.6 の 3 を満たすことを示す。任意の射影行列 P について、 $X^{1/2}PX^{1/2} \leq X$ であることに注意すると

$$f(PXP) = PXPg(PXP) = PX^{1/2}g(X^{1/2}PX^{1/2})X^{1/2}P \leq PX^{1/2}g(X)X^{1/2}P = PXg(X)P = Pf(X)P \quad (3.26)$$

となり、欲しかった不等式を得る。ただし二つ目の等式では $X^{1/2}Pg(PXP) = g(X^{1/2}PX^{1/2})X^{1/2}P$ が成り立つことを用いている。□

定理 3.8. $f(x)$ は $[0, \infty)$ 上で $f(x) \leq 0$ を満たす連続関数とする。このとき、 $f(X)$ が作用素凸関数であることと $-f(X)$ が作用素単調関数であることは等価である。

証明. (\Leftarrow): $-f(X)$ が作用素単調であるときに、 $f(X)$ が定理 3.6 の 2 を満たすことを示す。以下の証明では定理 3.6 の $1 \Rightarrow 2$ の証明の記法をそのまま用いる。

任意の $\varepsilon > 0$ に対し、十分大きい c が存在し

$$U^\dagger YU = \begin{pmatrix} A^\dagger XA & A^\dagger XB \\ BXA & BXB \end{pmatrix} \leq \begin{pmatrix} A^\dagger XA + \varepsilon & O \\ O & cI \end{pmatrix} =: G \quad (3.27)$$

と出来る。よって

$$\begin{pmatrix} A^\dagger f(X)A & A^\dagger f(X)B \\ Bf(X)A & Bf(X)B \end{pmatrix} = U^\dagger \begin{pmatrix} f(X) & O \\ O & O \end{pmatrix} U \geq U^\dagger \begin{pmatrix} f(X) & O \\ O & f(O) \end{pmatrix} U = U^\dagger f(Y)U = f(U^\dagger YU) \geq f(G) \quad (3.28)$$

が得られる。 $\varepsilon \rightarrow 0$ をとることで、左上の成分を見ることにより $A^\dagger f(X)A \geq f(A^\dagger XA)$ を得る。

(\Rightarrow): $O \leq X \leq Y$ 、 $0 \leq k \leq 1$ とする。 $Z = \frac{k}{1-k}(Y - X) \geq O$ と置くと

$$kY = kX + (1-k)Z \quad (3.29)$$

と書けることに注意すると、

$$f(kY) = f(kX + (1-k)Z) \leq kf(X) + (1-k)f(Z) \leq kf(X) \quad (3.30)$$

が成り立つ。ただし最後の不等式では $f \leq 0$ を用いている。 $k \rightarrow 1$ の極限をとることにより、 $f(Y) \leq f(X)$ を得る。□

ちなみに $X \geq 0$ 上の作用素単調関数及び作用素凸関数は一般形が知られている⁴⁴。

⁴⁴ $f(X)$ が $X \geq 0$ 上で作用素単調関数である必要十分条件は、 $f(x)$ が、実数 a 、非負実数 $b \geq 0$ 、及び $[0, \infty)$ 上の非負の値をとる関数 $g(s)$ を用いて

$$f(x) = a + bx + \int_0^\infty \left(-\frac{1}{s+x} + \frac{s}{s^2+1} \right) g(s) ds \quad (3.31)$$

と書けることである。これを「ローナーの定理 (Loewner's theorem)」という。以上の内容は、内山充「作用素単調関数と作用素凸関数」https://www.jstage.jst.go.jp/article/sugaku1947/54/3/54_3_265/_pdf による。

4 特異値

この章では、行列を特徴づける重要な量である「特異値」を導入する。特異値は固有値と密接に関係しているが、固有値とは異なる新しい量である。量子力学における複合系のシュミット分解は、特異値分解そのものとして理解することができる。量子系に対する操作や情報科学における様々な処理が、特異値を用いて評価できることも少なくない⁴⁵。

次章で見るように、特異値を利用して行列に対する「ノルム」も導入できる。行列ノルムは、直観的には行列の「大きさ」を定量化したものであり、物理の様々な場所に現れる。

4.1 特異値分解

「特異値分解」とは、任意の行列 A に対する以下のような分解である。

定理 4.1 (特異値分解 (singular value decomposition)). 任意の行列 A は、ユニタリ行列 U, V と、対角成分が非負実数の対角行列 D を用いて

$$A = UDV^\dagger \quad (4.1)$$

と書ける。これを「特異値分解」という。また特異値分解の対角行列に現れる対角成分の数を「特異値 (singular value)」という。

ユニタリ対角化の場合と違い、 U と V は一般に異なるユニタリ行列である。特異値分解のイメージは、図 4 を見ると分かりやすいだろう。これは $M = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ に対する特異値分解の例である。

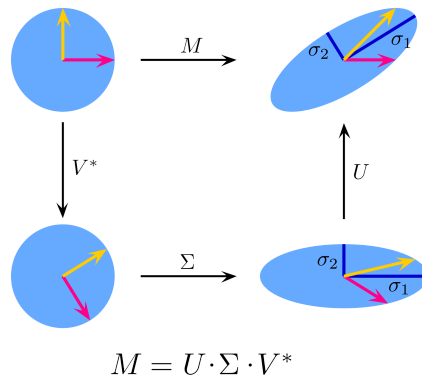


図 4: 特異値分解のイメージ図。 V^* で基底の向きを変換し、対角行列 Σ で各直交軸方向に伸縮を行い、 U で再び向きを変えている。画像は Wikipedia 「特異値分解」より引用。

なお、特異値分解は正方でない行列に対しても実行できる。この場合、真ん中の対角行列は「(ある範囲の) 対角成分のみ非負実数を取り、他はゼロ」という正方でない行列、二つのユニタリ行列はそれぞれ適切なサイズの正方行列となる⁴⁶。以下では、特に断らない場合は正方行列を考察対象とする。

⁴⁵一例として、さまざまな量子アルゴリズムによる高速化を量子特異値変換として統一的に理解しようという近年の研究を紹介しておく。John M. Martyn, Zane M. Rossi, Andrew K. Tan, and Isaac L. Chuang, *Grand Unification of Quantum Algorithms*, PRX Quantum 2, 040203 (2021)

⁴⁶正方行列でない場合には、例えば以下のような特異値分解ができる

$$\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \\ 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

任意の行列の特異値分解が可能であることを示すために、まず「極分解 (polar decomposition)」を導入しよう。これは複素数における極形式の一般化とも見れるものである。任意の複素数 z は

$$z = re^{i\theta} \quad (4.3)$$

と書ける。複素数をかけることを「複素数から複素数への変換」とみなすことができる (複素数 a を複素数 $b = za$ に変換する)。すると、極形式における r は「 a に対する動径方向の拡大・縮小」、 $e^{i\theta}$ は「原点中心の回転」とみなすことができる。

実は、一般の行列による変換も、このように「拡大・縮小」と「回転」の二つの要素に分けられる。任意の行列 A は、半正定値エルミート行列 H とユニタリ行列 U とを用いて

$$A = HU \quad (4.4)$$

と書くことができる。これは「極分解 (polar decomposition)」と呼ばれる分解である。すでに見たように、エルミート行列の固有ベクトルは互いに直交している。なので、半正定値エルミート行列 H は、ある直交座標に沿って、各軸をそれぞれの固有値だけ拡大・縮小させる変換を表している。一方、ユニタリ行列は座標の回転変換を表している。このように極分解は、線形変換 A を「拡大・縮小」と「回転」に分解するものだと理解できる。

証明. まず極分解が可能であることを示そう⁴⁷。任意の行列 A に対し、 $A^\dagger A$ を考えると、これは半正定値エルミート行列である。 $A^\dagger A$ の規格化された固有ベクトルを $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$ とする。対応する固有値は、 $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ は正、 $\lambda_{k+1}, \dots, \lambda_n$ はゼロとする。 $A^\dagger A$ はエルミートなので、 $\{\mathbf{u}\}$ たちは正規直交基底をなす。

ここで、別の正規直交基底 $\{\mathbf{v}\}$ として、 $\mathbf{v}_i = \lambda_i^{-1/2} A \mathbf{u}_i$ ($i = 1, \dots, k$) を満たすものとする⁴⁸。この \mathbf{v}_i 同士が互いに直交することは直接代入して容易に確認できる。すると、 $U = \sum_{i=1}^n \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\dagger$ と置くと、この U は確かに

$$U^\dagger U = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^\dagger \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\dagger = \sum_{j=1}^n \mathbf{u}_j \mathbf{u}_j^\dagger = I \quad (4.6)$$

を満たすのでユニタリである。さらに

$$AU^{-1} = AU^\dagger = \sum_{i=1}^n A \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\dagger = \sum_{i=1}^k \sqrt{\lambda_i} \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^\dagger = \sum_{i=1}^n \sqrt{\lambda_i} \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^\dagger \quad (4.7)$$

となり、これはエルミートである。よって $H = \sum_{i=1}^n \sqrt{\lambda_i} \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^\dagger$ と置けば、 $A = HU$ と極分解される。

特異値分解が可能であることは、極分解が可能であることから直ちに従う。エルミート行列 H はユニタリ対角化可能なので、ユニタリ行列 W と対角行列 D を用いて $H = W^\dagger D W$ の形で書くことができる。 $WU = V$ とユニタリ行列 V を定義すれば、 $A = W^\dagger D V$ と特異値分解できる。□

[4-1]. W^\dagger と V^\dagger は、それぞれ AA^\dagger 及び $A^\dagger A$ の固有ベクトルを並べたものであることを示せ。

また、これを利用して行列 $\begin{pmatrix} 6 & 0 & 6 \\ 2 & 4 & -5 \end{pmatrix}$ を特異値分解せよ。

特異値には、特異値分解によるものとはまた別の標準的な定義の仕方もある。両者は等価な定義を与える。

定理 4.2. 任意の行列 A について、 $A^\dagger A$ は半正定値エルミート行列なので、その固有値 λ_i は非負の実数であり、その平方根 $s_i = \sqrt{\lambda_i}$ を定義することができる。この s_i たちは、特異値と一致する。

⁴⁷ A が正則である場合には、以下のように簡単な証明ができる。

もし $A = HU$ と書けていたとすると、 $AA^\dagger = HUU^\dagger H^\dagger = H^2$ なので、 $H = (AA^\dagger)^{1/2}$ でないといけない。定理 3.3 で見たように行列のべき根は一意的なので、もし A が極分解されるのであれば、 H はこの形で一意的に定まる。 A の正則性の仮定により、 A^{-1} と H^{-1} が存在する。ここで実は $U = H^{-1}A$ はユニタリ行列である。この事実は、自身とその複素転置を掛けると

$$(H^{-1}A)^\dagger H^{-1}A = A^\dagger [(AA^\dagger)^{-1/2}]^\dagger (AA^\dagger)^{1/2} A = A^\dagger (AA^\dagger AA^\dagger)^{-1/2} A = A^\dagger (AA^\dagger)^{-1} A = A^\dagger (A^\dagger)^{-1} A^{-1} A = I \quad (4.5)$$

と単位行列になることから確認できる。

⁴⁸ $i = k+1, \dots, n$ については、正規直交基底をなすようになっていれば自由にとって構わない。

これが同じ特異値の定義を与えることは、 $A = UDV^\dagger$ と特異値分解されているとすると、 $A^\dagger A = VD^2V^\dagger$ とユニタリ対角化の形に書けることから直ちに従う。

4.2 特異値の性質

特異値の満たす性質をいくつか見ておこう。

定理 4.3. 正方行列 A の特異値 $\{s_i\}$ について以下が成り立つ

$$|\det A| = \prod_{i=1}^n s_i \quad (4.8)$$

[4-2]. 上記定理を証明せよ。

定理 4.4. 行列 A の特異値を $\{s_i\}$ 、固有値を $\{\lambda_i\}$ とする。このとき以下が成り立つ。

$$\sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 \leq \sum_{i=1}^n s_i^2 = \sum_{i,j} |A_{ij}|^2 \quad (4.9)$$

証明. シューア分解 (定理 2.3) を A に適用し、上三角行列 $T = UAU^\dagger$ を得る。[2-1] より、 T の対角成分は A の固有値 $\{\lambda_i\}$ の並べ替えである。

ここで

$$\mathrm{Tr}[TT^\dagger] = \sum_i |T_{ii}|^2 + \sum_{i<j} |T_{ij}|^2 \geq \sum_i |T_{ii}|^2 = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 \quad (4.10)$$

である一方、

$$\mathrm{Tr}[TT^\dagger] = \mathrm{Tr}[UAA^\dagger U^\dagger] = \mathrm{Tr}[AA^\dagger] = \sum_{i,j} |A_{ij}|^2 \quad (4.11)$$

であり、 AA^\dagger はエルミート行列なのでそのユニタリ対角化を思い出せば

$$\mathrm{Tr}[AA^\dagger] = \sum_{i=1}^n s_i^2 \quad (4.12)$$

である⁴⁹。よって示された。 □

4.3 最小二乗法と一般逆行列

これまで小中高や大学では様々な実験を行ったと思うが、実験で得られるデータは図 5 左のようにばらついたものであったと思う。これに対し、誤差を最小とるように図 5 右のようにデータをフィットしたことはあるだろう。特に、誤差を「ずれの二乗」で定義して、その誤差を最小にするようにするフィットする方法を「最小二乗法 (least squares method)」という。今回は特に簡単な場合として、多項式でフィッティングする状況を考える⁵⁰。

⁴⁹ $H = U^\dagger D U$ とユニタリ対角化されるとすると、 $\mathrm{Tr}[H] = \mathrm{Tr}[U^\dagger D U] = \mathrm{Tr}[D U U^\dagger] = \mathrm{Tr}[D]$ と計算できる。

⁵⁰本節の内容は、山本哲郎『行列解析ノート』サイエンス社、第 4 章に基づく。本節の説明が分かりにくいと感じたら、こちらも読んでみていただきたい。

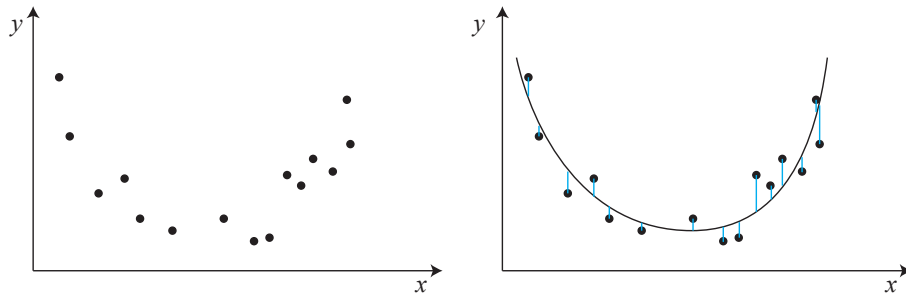


図 5: 左: 最小二乗法の問題設定。与えられたデータ点をよく近似する簡単な多項式関数を探す。右: 二次関数でフィットした例。図の青線の二乗の和を最小化するのが最小二乗法である。

与えられたデータ点を $(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)$ とする。これを k 次の多項式でなるべくよく近似することを考える。ただし $k \simeq N$ だと過学習 (overfitting)⁵¹ が生じるため、 $k \ll N$ という状況で考える。我々は、 $f(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + \dots + c_kx^k$ として

$$S = \sum_{i=1}^N |f(x_i) - y_i|^2 \quad (4.13)$$

を最小にするような c_0, \dots, c_k の組を求めたい。これを行列表示すると

$$X := \begin{pmatrix} x_1^k & x_1^{k-1} & \dots & x_1 & 1 \\ x_2^k & x_2^{k-1} & \dots & x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ x_N^k & x_N^{k-1} & \dots & x_N & 1 \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

$$\mathbf{c} := \begin{pmatrix} c_k \\ \vdots \\ c_0 \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

$$\mathbf{y} := \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

について、 X と \mathbf{y} が与えられた状況で

$$S = |\mathbf{X}\mathbf{c} - \mathbf{y}|^2 \quad (4.17)$$

を最小化するような \mathbf{c} を求める問題となる。以下では、より一般的な形の問題として、上記の形の X と \mathbf{y} に限らず、一般の X と \mathbf{y} に対し、式 (4.17) で与えられる S を最小化する問題を考えることにしよう。

この問題は、もし X が正方行列 ($k = N$) かつ正則行列ならば、 $\mathbf{c} = X^{-1}\mathbf{y}$ とすれば $S = 0$ となり、簡単に解が求まる。だが我々の関心がある状況は X が非常に縦長の行列である状況 (行数が列数と比べて非常に多い。 $k \ll N$ という事) であり、そのため逆行列はそもそも存在しないし、 $S = 0$ となるような \mathbf{c} も一般には存在しない。このような状況であっても、逆行列を一般化した「一般逆行列」を定義することができ、これを用いて原理的には最小二乗法を⁵² 解くことができる。

⁵¹例えば9つのデータ点に対し、8次関数を用いればすべてのデータ点を通る関数を作ることは出来る。しかし、それだと一般に関数は大きく暴れており、次の10個目のデータに対する予測能力は(例えば線形や二次などで近似した場合に比べて)著しく低くなってしまふ。このような状況を「過学習」という。

⁵²実際に数値的に最小二乗法を解く状況では、一般逆行列を用いる方法は計算コストが膨大になるためあまり用いられていない。

定義 4.1 (一般逆行列⁵³ (generalized inverse)). $N \times m$ 行列 X ($N \geq m$) の特異値分解が

$$X = U\Lambda_{Nm}(s_1, s_2, \dots, s_{m'})V \quad (4.18)$$

で与えられるとする。ただし U, V はそれぞれ $N \times N$, $m \times m$ のユニタリ行列であり、 m' は X のゼロでない特異値の個数、 $\Lambda_{Nm}(s_1, s_2, \dots, s_{m'})$ は $(1, 1) \sim (m', m')$ 成分がそれぞれ $s_1 \sim s_{m'}$ であり、残りの成分が全て 0 であるような $N \times m$ 行列である。

このとき、 X の一般逆行列を

$$X^+ = V^\dagger \Lambda_{mN} \left(\frac{1}{s_1}, \frac{1}{s_2}, \dots, \frac{1}{s_{m'}} \right) U^\dagger \quad (4.19)$$

と定義する。

定義を代入することにより、一般逆行列 X^+ が以下を満たすことは容易に確認できる。

$$X^+XX^+ = X^+, \quad XX^+X = X \quad (4.20)$$

また同じく定義を代入することにより、 XX^+ および X^+X はエルミート行列であること、さらにその固有値は 1 と 0 の二通りの値のみであることが確認できる。つまり、 XX^+ および X^+X はある部分空間への射影行列 (projection matrix) である。(なお、与えられた X に対し、 $X^+XX^+ = X^+$ と $XX^+X = X$ が成り立ち、 XX^+ および X^+X がエルミート行列であるような行列 X^+ は、式 (4.19) で定義された行列しか存在しないことが証明されている⁵⁴。そのため、一般逆行列はこの意味で一意的である。)

この一般逆行列を用いて最小二乗法を解くことが出来る。

定理 4.5. $\mathbf{c}^* = X^+\mathbf{y}$ とする。このとき、任意の m 次元ベクトル \mathbf{c} について

$$|X\mathbf{c}^* - \mathbf{y}| \leq |X\mathbf{c} - \mathbf{y}| \quad (4.21)$$

が成り立つ。すなわち \mathbf{c}^* は最小二乗解となる。

証明. 示すべきは以下の不等式である。

$$|XX^+\mathbf{y} - \mathbf{y}| = |-(I - XX^+)\mathbf{y}| \leq |X\mathbf{c} - \mathbf{y}| \quad (4.22)$$

既にみたように XX^+ はある部分空間 V への射影行列である。そのため $I - XX^+$ はその補空間 V^\perp への射影行列である。さらに、式 (4.20) より

$$(I - XX^+)X\mathbf{c} = X\mathbf{c} - (XX^+X)\mathbf{c} = X\mathbf{c} - X\mathbf{c} = \mathbf{0} \quad (4.23)$$

が成り立つ。すなわち、ベクトル $X\mathbf{c}$ は部分空間 V^\perp と直交している。よって、ベクトル $X\mathbf{c} - \mathbf{y}$ を部分空間 V^\perp に射影して得られるベクトルは、 $-\mathbf{y}$ を部分空間 V^\perp に射影して得られるベクトルに等しく、 $-(I - XX^+)\mathbf{y}$ だと分かる。ベクトルは、射影するとノルムが小さくなる⁵⁵ ことが知られているので、 $|X\mathbf{c} - \mathbf{y}| \geq |(I - XX^+)(X\mathbf{c} - \mathbf{y})| = |-(I - XX^+)\mathbf{y}|$ と求めたい不等式が得られた。□

⁵³ 「ムーア・ペンローズ逆行列 (Moore-Penrose inverse)」「疑似逆行列 (psuedoinverse)」などとも呼ばれる。

⁵⁴ 証明は例えば山本哲郎『行列解析ノート』サイエンス社 4.2 節に出ている。

⁵⁵ 「 \mathbf{a} と \mathbf{y} が直交しているとき、 $|\mathbf{a} + \mathbf{y}| \geq |\mathbf{a}|$ が成り立つ」と言ってもよい。

5 ノルム

5.1 ベクトルのノルム

まずベクトル空間の元に対する「ノルム」というものを導入しよう。ノルムは、ベクトル空間の元のある種の「長さ」を定量化するものである。

定義 5.1 (ノルム (norm)) . ノルム $|\cdot|$ とは、以下の性質を満たす K 上⁵⁶のベクトル空間 V から非負実数 $\mathbb{R}^{\geq 0}$ への写像である。ただし以下 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in V$ 、 $a \in K$ である。

- 独立性： $|\mathbf{x}| = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0}$
- 斉次性： $|a\mathbf{x}| = |a| |\mathbf{x}|$
- 劣加法性： $|\mathbf{x} + \mathbf{y}| \leq |\mathbf{x}| + |\mathbf{y}|$

ベクトル $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$ の代表的なノルムとしては、以下の p -ノルムがある。

定義 5.2 (p -ノルム). ベクトル $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$ の p -ノルム ($1 \leq p$) を

$$|\mathbf{x}|_p := \left(\sum_i |x_i|^p \right)^{1/p} \quad (5.1)$$

で定義する。ただし $p = \infty$ の場合は

$$|\mathbf{x}|_\infty := \max_i |x_i| \quad (5.2)$$

で定義する。

$p = \infty$ の場合は、 $p \rightarrow \infty$ の極限としても得ることができる ($\lim_{p \rightarrow \infty} |\mathbf{x}|_p = |\mathbf{x}|_\infty$)。 $p = 2$ の場合は「ユークリッドノルム」、 $p = \infty$ の場合は「最大値ノルム」とも呼ばれる。特に注記がない場合、ベクトルのノルムはユークリッドノルムを指している場合が多い。この講義ノートでもその慣習に従う。

p -ノルムが本当にノルムであること、すなわちノルムの公理を満たしていること、は確認する必要がある。独立性と斉次性は明らかなので、非自明なのは劣加法性である。この証明はいささか難しいので、この章の補論の 5.3 節で示すことにする。

一般のノルム $|\cdot|$ が与えられると、そのノルムを用いて $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := |\mathbf{x} - \mathbf{y}|$ と定義することにより、2つの元 \mathbf{x}, \mathbf{y} の間の「距離 (distance)」を定義することができる。このように定義された距離は、確かに距離の公理⁵⁷を満たしている。なお、すべてのノルムは対応する距離を持つが、対応するノルムを持たない距離も定義できる⁵⁸。

p -ノルムは以下の性質を満たす。

定理 5.1. 任意の \mathbf{x} と $1 \leq p \leq q$ に対し

$$|\mathbf{x}|_p \geq |\mathbf{x}|_q \quad (5.3)$$

⁵⁶体 K には絶対値が定義されている必要がある。 K は実数 \mathbb{R} または複素数 \mathbb{C} にとるのが普通である。

⁵⁷ $d(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ が距離であるためには

- 非退化性： $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{y}$
- 対称性： $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = d(\mathbf{y}, \mathbf{x})$
- 三角不等式： $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + d(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \geq d(\mathbf{x}, \mathbf{z})$

を満たす必要がある。なお、これらの性質から非負性 $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \geq 0$ は導出できる。

⁵⁸最も極端な例は、 $d(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ として、 $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ のときは 0、 $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ のときは常に 1 とする「離散距離 (discrete metric)」である。

証明. $a := \frac{q}{p} \geq 1$, $z_i := |x_i|^p$ と置くと、証明すべき式は

$$\left(\sum_i z_i \right)^a \geq \sum_i z_i^a \quad (5.4)$$

と書ける。 $f(t) = t^a$ は単調増大かつ下に凸な関数なので、 t が大きいほど傾きも大きくなる。よって $(t+s)^a \geq t^a + s^a$ が成り立つ。これを用いて、要素数 n に対する帰納法により⁵⁹、求める式 (5.4) を得る。□

定理 5.2. 任意の \mathbf{x} に対し

$$|\mathbf{x}|_1 \leq \sqrt{n} |\mathbf{x}|_2 \leq n |\mathbf{x}|_\infty \quad (5.5)$$

証明. 以下、記述を簡単にするため、 x_i は実かつ非負として、絶対値は外して記述する。

一つ目の不等式は

$$\left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2 \leq n \sum_{i=1}^n x_i^2 \quad (5.6)$$

と書ける。この不等式は、左辺を展開して相加相乗平均の不等式 $2xy \leq x^2 + y^2$ を適用することで直ちに示せる。

二つ目の不等式は

$$\sum_{i=1}^n x_i^2 \leq n \left(\max_i x_i \right)^2 \quad (5.7)$$

と書けるが、これは \max の定義より明らかである。□

5.2 行列のノルム

では次に行列のノルムを定義しよう。まず、よく用いられる行列のノルムである「シャッテンノルム」を導入する。

定義 5.3 (シャッテンノルム (Schatten norm)). $n \times n$ 行列 A の特異値を s_1, \dots, s_n とする。このとき、行列 A のシャッテン p -ノルムは、特異値を並べたベクトルの p -ノルム、すなわち

$$\|A\|_p := \left(\sum_{i=1}^n s_i^p \right)^{1/p} \quad (5.8)$$

で定義する。

$p = \infty$ の場合は、シャッテンノルムは最大特異値

$$\|A\|_\infty := \max_i s_i \quad (5.9)$$

であり、これは特に「演算子ノルム (operator norm)」または「スペクトルノルム (spectral norm)」と呼ばれる。

行列のノルムとして、演算子ノルムは特によく用いられる。添え字を付けずにただ $\|A\|$ と書いた場合、演算子ノルムを指すことが多い。この講義でもそのような表記を用いる。それ以外によく用いられるシャッテンノルムでは、 $p = 1$ の場合が「トレースノルム (trace norm)」、 $p = 2$ の場合が「フロベニウスノルム (Frobenius norm)」と呼ばれている。

⁵⁹ 求める式は $(\sum_{i=1}^n z_i)^a \geq \sum_{i=1}^n z_i^a$ と書ける。 $n = k$ で成り立つと仮定する。 $n = k+1$ の場合、帰納法の仮定と $(t+s)^a \geq t^a + s^a$ を用いて $(\sum_{i=1}^{k+1} z_i)^a = ((\sum_{i=1}^k z_i) + z_{k+1})^a \geq (\sum_{i=1}^k z_i)^a + z_{k+1}^a \geq \sum_{i=1}^{k+1} z_i^a$ と示せる。

シャッテンノルムが確かにノルムの公理を満たすことは確認する必要がある。独立性と斉次性は明らかなので、非自明なのは劣加法性である。この証明はいささか面倒なので、後の 8.3 章で示すことにする。

特異値の性質より、任意のユニタリ行列 U, V に対し、明らかに

$$\|UAV\|_p = \|A\|_p \quad (5.10)$$

が成り立つ。またシャッテン p -ノルムは特異値を並べたベクトルに対する p -ノルムなので、定理 5.1、定理 5.2 より以下が直ちに従う。

定理 5.3. 任意の A と $1 \leq p \leq q$ に対し

$$\|A\|_p \geq \|A\|_q \quad (5.11)$$

定理 5.4. 任意の A に対し

$$\|A\|_1 \leq \sqrt{n}\|A\|_2 \leq n\|A\|_\infty \quad (5.12)$$

式 (4.9) の右の等式より、 $p = 2$ のフロベニウスノルムは行列の各成分を二乗して足したものと一致する。

$$\|A\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |A_{ij}|^2 \quad (5.13)$$

次に、シャッテンノルムとは別の、よく用いられる行列のノルムである「誘導ノルム」を定義しよう。

定義 5.4 (誘導ノルム (induced norm)). p -ノルムが誘導する行列ノルム $\|\cdot\|_p^{\text{ind}}$ を

$$\|A\|_p^{\text{ind}} = \max_{\|\mathbf{x}\|_p=1} \|A\mathbf{x}\|_p \quad (5.14)$$

で定義する⁶⁰。

[5-1]. $p = 1$ および $p = \infty$ の誘導ノルムは、それぞれ絶対値をとった行列成分の行および列における和の最大値に一致する、すなわち

$$\|A\|_1^{\text{ind}} = \max_j \sum_i |A_{ij}| \quad (5.15)$$

$$\|A\|_\infty^{\text{ind}} = \max_i \sum_j |A_{ij}| \quad (5.16)$$

が成り立つことを示せ。

行列を線形変換として見ることにすると、誘導ノルムは、対応するベクトルノルムで見て「その線形変換はどのくらいベクトルを引き延ばせるか」の上限を与える量となる。特に重要なのは、通常のノルム (ユークリッドノルム) である $p = 2$ の場合である。

⁶⁰ p -ノルムに限らない一般のベクトルノルムに対しても、誘導ノルムを定義することはできる。

定理 5.5. ユークリッドノルムの誘導ノルムは、演算子ノルムと一致する。

$$\|A\|_2^{\text{ind}} = \|A\|_\infty \quad (5.17)$$

証明.

$$(\|A\|_2^{\text{ind}})^2 = \max_{|\mathbf{x}|=1} \mathbf{x}^\dagger A^\dagger A \mathbf{x} = \lambda_{\max}(A^\dagger A) = s_{\max}^2(A) = \|A\|_\infty^2 \quad (5.18)$$

ただし二つ目の等式では、エルミート行列 $A^\dagger A$ の最大固有値の表示を用いた。□

この性質があるため、演算子に関する不等式評価では、演算子ノルムを用いた不等式がよく表れる。例えば量子力学では、ハミルトニアンが大きければ大きいほど素早く時間発展できるので、時間発展の速度を評価する際には「ハミルトニアンの大きさ」を用いた不等式評価を行いたいが、その際には演算子ノルムがしばしば用いられる。また、観測物理量のゆらぎが小さいことを示したい場合には、ゆらぎを「観測物理量のとりうる大きさ×小さい量」のような形で上から押さえることになるが、この際の「観測物理量の大きさ」が演算子ノルムで評価されることも多い。

定義 5.5. 行列 A の固有値の絶対値の最大値 $\rho(A) := \max_i |\lambda_i|$ を、行列 A の「スペクトル半径 (spectral radius)」という。

定理 5.6. 任意の誘導ノルム⁶¹はスペクトル半径よりも大きい。

$$\rho(A) \leq \|A\|_p^{\text{ind}} \quad (5.19)$$

証明. 最大固有値を λ_{\max} と書く。 $|\mathbf{x}|_p = 1$ となる固有ベクトルを用いた固有値方程式 $A\mathbf{x} = \lambda_{\max}\mathbf{x}$ の両辺のノルムを考えることで

$$|A\mathbf{x}|_p = |\lambda_{\max}\mathbf{x}|_p = |\lambda_{\max}| |\mathbf{x}|_p = |\lambda_{\max}| \quad (5.20)$$

を得る。 $|\mathbf{x}|_p = 1$ の条件下では $|A\mathbf{x}|_p \leq \|A\|_p^{\text{ind}}$ なので、任意の誘導ノルムでスペクトル半径は上から押さえられる。□

[5-2]. 2×2 行列で、演算子ノルムがスペクトル半径よりも真に大きい例を一つ挙げよ。

5.3 <補論>：劣加法性の証明

この節では、 p -ノルムが劣加法性を満たすことを証明する。

定理 5.7 (ジェンセンの不等式 (Jensen's inequality)). $f(x)$ を下に凸な関数、 $\{c_i\}_{i=1}^n$ を、 $c_i \geq 0$ 、 $\sum_{i=1}^n c_i = 1$ を満たす任意の係数とする。このとき、任意の $\{x_i\}_{i=1}^n$ について以下の不等式が成り立つ。

$$f\left(\sum_{i=1}^n c_i x_i\right) \leq \sum_{i=1}^n c_i f(x_i) \quad (5.21)$$

関数が上に凸の場合は、不等式の向きが逆向きになる。

⁶¹これは p -ノルムが誘導したノルムに限らず、一般の誘導ノルムで成り立つ。

ジェンセンの不等式は、 $n = 2$ の場合は凸の定義そのもので、 $n \geq 3$ の場合は数学的帰納法によって証明することができる⁶²。ここでは以下の図 6 を見ることで、それが成り立つことを図形的に確認するにどめる。

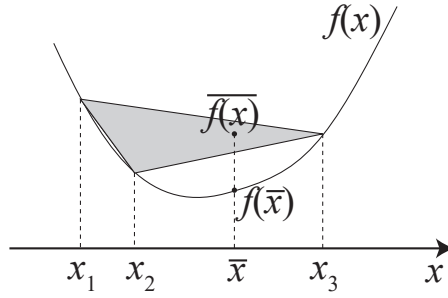


図 6: ジェンセンの不等式が成り立つ理由を表した図。ただし $\bar{x} := \sum_{i=1}^n c_i x_i$ 、 $\overline{f(x)} := \sum_{i=1}^n c_i f(x_i)$ である。 $\overline{f(x)}$ が常に灰色の多角形の中にあるのに対し、 $f(\bar{x})$ は常に関数 $y = f(x)$ の曲線上で、これは灰色の領域よりも下にある。

定理 5.8 (ヤングの不等式 (Young's inequality)). $a, b > 0$ 、 $p, q > 1$ 、 $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ とする。このとき

$$\frac{a^p}{p} + \frac{b^q}{q} \geq ab \quad (5.23)$$

証明. $f(x) = e^x$ は下に凸な関数である。 $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ より、ジェンセンの不等式を用いると

$$\frac{1}{p} e^x + \frac{1}{q} e^y \geq e^{x/p + y/q} \quad (5.24)$$

が得られる。 $x = p \ln a$ 、 $y = q \ln b$ と置くと、求めたいヤングの不等式 (5.23) を得る。□

定理 5.9 (ヘルダーの不等式 (Hölder's inequality)). $p, q > 1$ 、 $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ とする。また \mathbf{x}, \mathbf{y} を n 次元ベクトルとする。このとき

$$\sum_{i=1}^n |x_i y_i| \leq |\mathbf{x}|_p |\mathbf{y}|_q = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{1/p} \left(\sum_{i=1}^n |y_i|^q \right)^{1/q} \quad (5.25)$$

証明. ヤングの不等式において、 $a = |x_i| / |\mathbf{x}|_p$ 、 $b = |y_i| / |\mathbf{y}|_q$ と置くと

$$\frac{|x_i|^p}{p |\mathbf{x}|_p^p} + \frac{|y_i|^q}{q |\mathbf{y}|_q^q} \geq \frac{1}{|\mathbf{x}|_p |\mathbf{y}|_q} |x_i y_i| \quad (5.26)$$

を得る。 i について 1 から n まで和をとれば、

$$\frac{1}{|\mathbf{x}|_p |\mathbf{y}|_q} \sum_i |x_i y_i| \leq \sum_i \frac{|x_i|^p}{p |\mathbf{x}|_p^p} + \frac{|y_i|^q}{q |\mathbf{y}|_q^q} = \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1 \quad (5.27)$$

⁶² $n = k$ までジェンセンの不等式が成り立つとする。 $C = \sum_{i=1}^k c_i$ とする。このとき、

$$\sum_{i=1}^{k+1} c_i f(x_i) = \sum_{i=1}^k c_i f(x_i) + c_{k+1} f(x_{k+1}) \leq C f \left(\sum_{i=1}^k \frac{c_i}{C} x_i \right) + c_{k+1} f(x_{k+1}) \leq f \left(C \sum_{i=1}^k \frac{c_i}{C} x_i + c_{k+1} x_{k+1} \right) = f \left(\sum_{i=1}^{k+1} c_i x_i \right) \quad (5.22)$$

となり、 $n = k + 1$ でも成り立つことが示せる。

となり、これは求めたかったヘルダーの不等式そのものである。 □

いよいよ、 p -ノルムの劣加法性を証明する。

定理 5.10 (ミンコフスキーの不等式⁶³ (Minkowski's inequality)). $1 \leq p$ のとき

$$|\mathbf{x} + \mathbf{y}|_p \leq |\mathbf{x}|_p + |\mathbf{y}|_p \quad (5.28)$$

証明. 式 (5.28) の左辺を p 乗すると

$$|\mathbf{x} + \mathbf{y}|_p^p = \sum_i |x_i + y_i|^p \leq \sum_i |x_i| |x_i + y_i|^{p-1} + \sum_i |y_i| |x_i + y_i|^{p-1} \quad (5.29)$$

と評価できる。右辺第一項に対し、 $q = \frac{p}{p-1}$ と置いてヘルダーの不等式を当てはめると

$$\sum_i |x_i| |x_i + y_i|^{p-1} \leq \left(\sum_i |x_i|^p \right)^{1/p} \left(\sum_i (|x_i + y_i|^{p-1})^{p/(p-1)} \right)^{(p-1)/p} = |\mathbf{x}|_p |\mathbf{x} + \mathbf{y}|_p^{p-1} \quad (5.30)$$

が得られる。右辺第二項も同様に評価できるので、まとめると、

$$|\mathbf{x} + \mathbf{y}|_p^p \leq |\mathbf{x}|_p |\mathbf{x} + \mathbf{y}|_p^{p-1} + |\mathbf{y}|_p |\mathbf{x} + \mathbf{y}|_p^{p-1} = (|\mathbf{x}|_p + |\mathbf{y}|_p) |\mathbf{x} + \mathbf{y}|_p^{p-1} \quad (5.31)$$

が得られる。両辺を $|\mathbf{x} + \mathbf{y}|_p^{p-1}$ で割り、求めたかったミンコフスキーの不等式 (5.28) を得る。 □

⁶³このミンコフスキーは、ミンコフスキー時空に名を残すヘルマン・ミンコフスキー (Hermann Minkowski) である。

6 凸性と双対性

この章では、行列とベクトルはすべて実数のみを成分に持つものとする⁶⁴。

6.1 凸性と超平面分離定理

定義 6.1 (凸集合). ベクトル空間 V の部分集合 W について、 W の任意の元 $x, y \in W$ と任意の $0 \leq t \leq 1$ について、 $tx + (1-t)y \in W$ が成り立つとき、 W は凸であるという。

凸集合の定義の意味を図示すると図 7 左のようになる。 W に含まれる二つの点 x, y を結んだ線分がすべてすっぽりと W に含まれている、というのが凸集合の定義である。逆にある集合が凸でない場合には、図 7 右のように、ある x, y が存在し、 x, y を結んだ線分が W の外側に飛び出す。前の章で見た「関数 $f(x)$ が下に凸」というのは、「集合 $S := \{(x, y) | y \geq f(x)\}$ が凸」と読み替えられる。

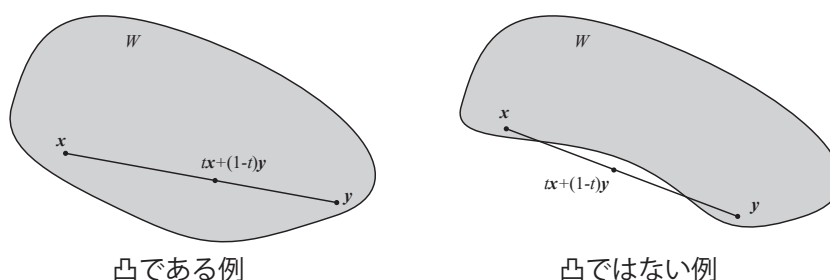


図 7: 左: 凸集合の例。右: 凸でない集合の例。

[6-1]. A を与えられた $n \times m$ 実行列とする。集合 $S := \{y | y = Ax, x \geq 0\}$ は凸であることを示せ。ただし $x \geq 0$ は、 m 次元ベクトル x のすべての成分が非負であることを意味している。

凸集合を特徴づけるために、内部及び境界をきちんと定義しておこう。

定義 6.2 (内点と境界点). ベクトル空間の部分集合 S に含まれる点 x について、「ある $\varepsilon > 0$ が存在し、任意の $|y - x| < \varepsilon$ となる y が S に含まれる」が成り立つとき、点 x は集合 S の「内点 (interior point)」であるという。

内点ではない点を、集合 S の「境界点 (boundary point)」という。

要するに、 x の近傍がすべてすっぽり S に含まれている点を内点と呼ぶということである。定義により、開集合は境界点を持たず、逆に閉集合は境界点で囲まれた集合である⁶⁵。

凸集合 S が n 次元空間中にある場合、境界点の集合は $n - 1$ 次元以下である。

定義 6.3 (端点). 閉凸集合 S において、 S に含まれる二つの点の内点として表せない点を、その閉凸集合 S の「端点 (end)」という。

閉凸集合において、端点は必ず境界点だが、境界点は必ずしも端点ではない。例えば \mathbb{R}^2 中の閉集合 $0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1$ を考えると、境界点は $x = 0, x = 1, y = 0, y = 1$ の 4 つの線分だが、端点は $(0, 0), (0, 1), (1, 1), (1, 0)$ の 4 つの頂点のみである。角ばっている集合の場合にはこのように端点は有限個

⁶⁴ この章の内容は、P. ラックス『線形代数』丸善出版、第 12, 13 章に基づく

⁶⁵ これは距離空間における開集合の定義そのものである。

の点のみであるが、境界が曲がっている集合の場合には事情が異なる。例えば $x^2 + y^2 \leq 1$ の円の場合、 $x^2 + y^2 = 1$ の円周上の点はすべて端点である。

定理 6.1 (カラテオドリの定理 (Caratheodory's theorem)). n 次元空間中の閉凸集合の任意の点は、 $n + 1$ 個以下の端点の内分で表せる。

直観ではそんな感じもする定理だが、きちんと示そうとすると細かな議論が割と面倒くさい。ここでは証明の概略を示すにとどめる⁶⁶。

1. n 次元中の閉凸集合 S 中の与えられた点 x について、それを通過する線分を考えると、これはどこかで境界と交差する。その境界点 x_1^1 と x_1^2 が端点ではない場合、「 x_1^1 を内分点として与えることのできる点の集合 S_1^1 」を考えることができる。 S_1^1 は閉凸集合であり、次元は $n - 1$ 以下である。 (x_1^2) も同様とする)
2. $n - 1$ 次元中の閉凸集合 S_1^1 中の与えられた点 x_1^1 について、上と同じ手続きを繰り返し、 $x_2^{1,1}, x_2^{1,2}$ が得られる。これをさらに繰り返して $x_3^{1,1,1}, \dots$ が順に得られる。 S_1^1, S_2^1, \dots と進みにつれ、次元が少なくとも一つずつ下がっていくので、高々 n 回で手続きは終わり、そのとき端点に到達する。
3. このようにして得られた端点たちを結んで作られる凸体 T を考える。端点は 2^n 個以下であり、構成により T は x を含む。
4. n 次元の凸超多面体は、超多面体の端点を頂点に持つ頂点数 $n + 1$ 個の超角錐たちに分割できる。
5. x は T の端点を頂点に持つ頂点数 $n + 1$ 個の超角錐のどれかに含まれるので、 $n + 1$ 個の端点の内分で x を与えることができる。

さて凸集合の満たす重要な性質として「超平面分離定理⁶⁷」がある。それを述べるために、まず一般次元のベクトル空間における「超平面 (hyperplane)」を定義しよう。今回は特に、 n 次元ベクトル空間における $n - 1$ 次元の超平面を考える。 $n - 1$ 次元超平面は、規格化されたベクトル v ($|v| = 1$) と数 a を用いて

$$\{x \mid \langle v, x \rangle = a\} \tag{6.1}$$

と書くことができる。ただし $\langle v, x \rangle = v^\dagger x$ は内積である⁶⁸。この超平面は、 v と垂直で、かつ原点からの距離が a であるような空間である (図 8)。

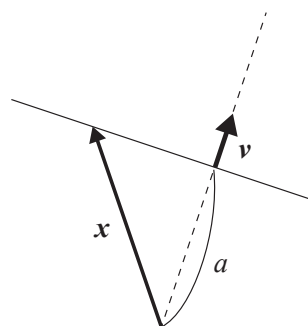


図 8: 超平面のイメージ図

ベクトル空間は、超平面によって 2 つに分割される。特にその一方の「半空間 (half-space)」は

$$\{x \mid \langle v, x \rangle \leq a\} \tag{6.2}$$

のように書くことができる (不等号を逆にすればもう一方の半空間が指定できる)。

⁶⁶P. ラックス『線形代数』丸善出版 第 12 章に証明が出ているので、興味のある方はそちらをご覧ください。

⁶⁷「分離超平面定理」ともいう。

⁶⁸今は実ベクトルに限って考えているので、 $v^\dagger x = v^T x$ と書いてもよい。

定理 6.2 (超平面分離定理 (hyperplane separating theorem)). ベクトル空間中に、互いに重なり合わない二つの有界閉凸集合 A, B がある⁶⁹。このとき、 A と B を分離する超平面が存在する。すなわち、適切なベクトル v と実数 a が存在し、任意の $x \in A$ について $\langle v, x \rangle > a$ 、かつ任意の $y \in B$ について $\langle v, y \rangle < a$ が成り立つ。

超平面分離定理の主張を図示すると、図 9 のようになる。このような超平面 (図では線) を必ず引けるというのが、超平面分離定理の主張である。直感的には明らかともいえるが、きちんと示そうと思うと少し工夫が必要である。超平面分離定理は、以下の定理から直ちに従う。こちらの定理を超平面分離定理と呼ぶこともある。

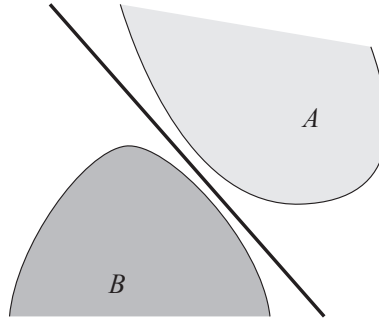


図 9: 超平面分離定理のイメージ図。

定理 6.3. S を閉凸集合、 y を S に含まれない点とする。このとき、 S を含むが y を含まない半空間が存在する。

定理 6.3 を認めれば、超平面分離定理 (定理 6.2) は直ちに導ける。

定理 6.3 を認めた超平面分離定理 (定理 6.2) の証明. 集合 C として

$$C := \{x - z \mid x \in A, z \in B\} \quad (6.3)$$

というものを考える。 A, B が凸なので C も凸であり、 A, B が有界閉なので C も (有界) 閉である。また、 A と B が重なり合っていないことから、 C は原点を含まない。そのため定理 6.3 により、ベクトル v と実数 c で、任意の $w \in C$ について $\langle v, w \rangle > c$ かつ $\langle v, 0 \rangle = 0 < c$ を満たすものが存在する。

特に $x^* \in A$ として $\langle v, x \rangle$ を最小化するもの⁷⁰、 $z^* \in B$ として $\langle v, z \rangle$ を最大化するものを選べば

$$\langle v, w^* \rangle = \langle v, x^* \rangle - \langle v, z^* \rangle = \min_x \langle v, x \rangle - \max_z \langle v, z \rangle > c > 0 \quad (6.4)$$

が成り立つことがわかる。よって、超平面として、 v はそのまま、 a は $a = \max_z \langle v, z \rangle + \frac{c}{2}$ と選べば、求めたかった分離平面が得られる。□

6.2 線形計画問題の弱双対定理

一定の拘束条件の下で、何かを最大化・最小化したい、という状況は、様々な場所で直面するタイプの問題である。例えば、以下のような問題を考えてみよう。

⁶⁹ A, B 両方とも開凸集合であっても構わない。ただし一方が開で一方が閉だと反例がある。

⁷⁰ $\langle v, x \rangle$ が下限を持たないとすると、 $\langle v, w \rangle = \langle v, x - z \rangle$ がいくらでも小さく出来てしまうので、 $\langle v, w \rangle = \langle v, x - z \rangle > c$ が任意の $x \in A, z \in B$ で成り立つような c は存在しなくなってしまう。

なお、 A, B は閉集合なので最小化、最大化するような点は集合内部に存在する。

Q: あなたはフェスティバルでお菓子を販売する計画をしており、そのための調理機械を何台か購入しようとしている。フェスティバルは3日あり、初日はクッキー1000枚、2日目はマドレーヌ300個、3日目はスコーン400個を作る必要がある。調理機械はAとBの2種類があり、1台が1日に作れるお菓子の数は以下の表の通りである。機械の値段はAが5万円、Bが3万円とする。必要なお菓子が作れるように、なるべく値段を押さえて機械を購入したい。機械A,Bをそれぞれ何台買うのが最も得か。

	機械 A	機械 B
クッキー	70 枚	40 枚
マドレーヌ	20 個	20 個
スコーン	25 個	10 個

これを線形代数の言葉で書くと次のようになる。

$$\min_{x_A, x_B} \begin{pmatrix} 5 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_A \\ x_B \end{pmatrix} \quad \text{s.t.} \quad \begin{pmatrix} 70 & 40 \\ 20 & 20 \\ 25 & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_A \\ x_B \end{pmatrix} \geq \begin{pmatrix} 1000 \\ 300 \\ 400 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} x_A \\ x_B \end{pmatrix} \geq \mathbf{0} \quad (6.5)$$

ただし、ベクトルの間の不等式 $\mathbf{a} \geq \mathbf{b}$ は、ベクトルのすべての成分で \mathbf{a} の方が \mathbf{b} よりも値が大きい、つまり $a_i \geq b_i$ が全 i で成り立つということを意味する。また「s.t.」は「such that」の略で「次の条件を満たすように」という意味である。「s.t.」以下に書かれているのが拘束条件で、この条件を満たすように x_A, x_B は値をとる。

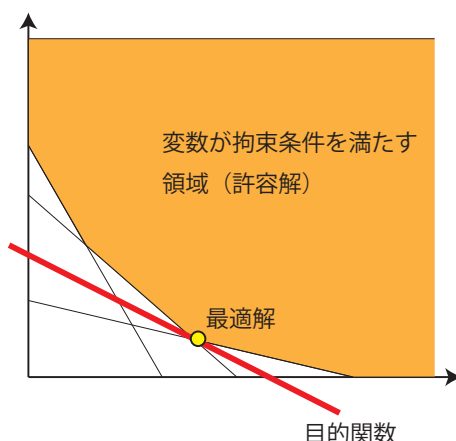


図 10: 線形計画問題の例。オレンジの領域中の点で、その点を通る与えられた傾きの直線（目的関数）が可能な限り下になるようにしたい。

機械の台数は本当は整数値のみをとるので、これは離散最適化問題なのだが、以下では取り扱いやすくするため任意の実数値の台数も許すことにして考えることにする。そうするとこの問題は、以下のような「線形計画問題」の一種となる⁷¹。

定義 6.4 (線形計画問題 (linear programming problem)). 以下の形の最適化問題を線形計画問題と呼ぶ。

$$\min_{\mathbf{x}} \mathbf{c}^\top \mathbf{x} \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{a}_i^\top \mathbf{x} \geq b_i, \quad \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \quad (6.6)$$

ただしここで $\mathbf{c}, \mathbf{a}_i, b_i$ は与えられたベクトル及び数であり、 $i \in \{1, \dots, m\}$ は拘束条件のラベルである。

⁷¹s.t. 以降の不等号は等号の場合もある。

先程のお菓子の例であれば、 \mathbf{c} 、 \mathbf{a}_i は 2 次元ベクトルで、 $m = 3$ である。前の例では図 10 のように状況を図示することで最適解は割と簡単に求められるが、一般にはベクトルや行列が 100 次元など非常に高次元であり、直感的には全く取り扱えなくなる。

さてここで、「最適解らしき解 \mathbf{x}' 」が得られたとしよう。我々は、この \mathbf{x}' が本当に最適であることを確認したい。変数が 2 個であれば図 10 のように図を描けば確認できたが、100 次元ではそういうことは出来ないで、得られた「最適解らしき解 \mathbf{x}' 」が本当に最適なのかの確認は容易ではない。しかし幸いなことに、これを確認する方法が存在する。それは「双対問題」を利用する方法である。

定理 6.4 (弱双対定理 (weak duality theorem)). 線形計画問題 (6.6) の「双対問題 (dual problem)」を

$$\max_{y_1, y_2, \dots, y_m \geq 0} \sum_{i=1}^m b_i y_i \quad \text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^m y_i \mathbf{a}_i \leq \mathbf{c} \quad (6.7)$$

で定義する。双対問題に対し、元の問題 (6.6) は「主問題 (primal problem)」という。

最適解は関係なく、拘束条件を満たす変数の組を「許容解 (feasible solution)」という。例えばこの主問題であれば、 $\mathbf{a}_i^\top \mathbf{x} \geq b_i$ かつ $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$ である \mathbf{x} はすべて許容解である。

このとき、任意の主問題及び双対問題の許容解 \mathbf{x} 、 y_1, \dots, y_m について

$$\mathbf{c}^\top \mathbf{x} - \sum_{i=1}^m b_i y_i \geq 0 \quad (6.8)$$

が成り立つ。特に等号が成り立つならば、そのときの \mathbf{x} と y_1, \dots, y_m は、それぞれ主問題及び双対問題の最適解である⁷²。

双対問題の見た目は複雑で意味が分かりにくいので、再びお菓子の例で考えることにしよう。今までは機械を買ってお菓子を作る人のみを考えていたが、ここで「機械を売る人」の視点で見てみよう。機械を売る人には、「機械を売る」と「機械は売らずに自分で機械を使ってお菓子を作る」という二通りの選択肢がある。二通りの選択肢の中で「機械を売る」方を選ぶということは、売る人から見ると「その機械が生み出せるお菓子の価値⁷³ (お菓子の価格×個数)」よりも「1 台の販売価格」の方が高いということである。クッキー、マドレーヌ、スコーンの妥当な価格を y_1, y_2, y_3 とすると、この条件は機械 A, B についてそれぞれ

$$70y_1 + 20y_2 + 25y_3 \leq 50000 \quad (6.9)$$

$$40y_1 + 20y_2 + 10y_3 \leq 30000 \quad (6.10)$$

ということの意味する⁷⁴。この式は $\sum_{i=1}^m y_i \mathbf{a}_i \leq \mathbf{c}$ に対応する。

一方、 $\sum_{i=1}^m b_i y_i = 1000y_1 + 300y_2 + 400y_3$ は、フェスティバルでの (その価格の元での) 総売上である。この状況での双対問題は、「さまざまなお菓子の価格設定のうち、『売り手が機械を売ってくれる』という条件の下での、総売上の最大値はいくらか」という問題である。弱双対定理の主張は、「どの機械についても『一台の機械が生み出せる価値よりも機械の販売価格の方が高い』ようなお菓子の価格状況ならば、『機械を売らずに自分でお菓子を作った場合の (その価格の元での) 総売上』よりも「機械の総販売収益」の方が高い、ということである。

弱双対定理を用いると、もし「最適解らしき解 \mathbf{x}' 」について、ある許容解 $y'_1, \dots, y'_m \geq 0$ が存在し

$$\mathbf{c}^\top \mathbf{x}' - \sum_{i=1}^m b_i y'_i = 0 \quad (6.11)$$

⁷²もし等号達成する \mathbf{x} が最適解でないとすると、最適解 $\mathbf{c}^\top \mathbf{x}^* \leq \mathbf{c}^\top \mathbf{x}$ について $\mathbf{c}^\top \mathbf{x}^* - \sum_{i=1}^m b_i y_i < 0$ となり、式 (6.8) に矛盾する。

⁷³もちろん実際には原材料費などがかかるが、ここでは原材料費は無視できるほど安く、機械さえあればお菓子ができる状況を考える。

⁷⁴売り手にとっては、フェスティバル以外には機械の使い道はないということにしておく。

が成り立った場合、 \mathbf{x}' が確かに最適解（の一つ）であり、 $\mathbf{c}^\top \mathbf{x}'$ が確かに最小値であると確認できる。一般に、最適解らしき解が本当に最適解であることの確認は易しくない（それより小さい値にならないことをきちんと示さないといけないが、それは難しい）ので、このような方法で最適性の確認ができるのは非常に便利である。

証明. 主問題 (6.6) の拘束条件に y_i を掛けて i の和をとり、双対問題 (6.7) の拘束条件を転置して右から \mathbf{x} を掛けることで、求めたい不等式

$$\sum_i b_i y_i \leq \sum_i y_i \mathbf{a}^\top \mathbf{x} \leq \mathbf{c}^\top \mathbf{x} \quad (6.12)$$

が得られる。□

6.3 線形計画問題の強双対定理

弱双対定理は、「もし主問題と双対問題の最適値が一致すれば」その値が確かに最適値であること保証してくれた。だが弱双対定理は、主問題と双対問題の最適値が一致するのかどうかは教えてくれない。もし一致しなければ、弱双対定理で最適値か否かを確認することはできない。しかし幸いなことに、実は真つ当な線形計画問題においては、主問題と双対問題の最適値が一致することが証明されている。それが「強双対定理」あるいは単に「双対定理」と呼ばれる定理である。

定理 6.5 (強双対定理 (strong duality theorem)). 線形計画問題の主問題と双対問題双方において、許容解が存在し、また最適値の発散が生じないとする。このとき、主問題の最小値と双対問題の最大値は一致する。

先程のお菓子の例であれば、強双対定理の主張は「あるお菓子の価格設定が存在して、『機械を売ってもらえる条件の下での最大の総売上』は『機械の購入費用』と一致する」ということである。

強双対定理を示すため、まず以下の補題を示す。

定理 6.6 (ファーカス・ミンコフスキーの補題 (Farkas-Minkowski lemma)). 任意の $m \times n$ 実行列 A と n 次元実ベクトル \mathbf{b} について、必ず以下の一方のみが成り立つ。

1. 非負の n 次元ベクトル $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$ が存在し、 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ が成り立つ。
2. m 次元ベクトル \mathbf{y} が存在し、 $\mathbf{y}^\top A \geq \mathbf{0}^\top$ かつ $\mathbf{y}^\top \mathbf{b} < 0$ が成り立つ。

証明. 1 が成り立つとする。2 の一つ目の条件 $\mathbf{y}^\top A \geq \mathbf{0}^\top$ が成り立つなら、1 の仮定により存在が示される $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$ を用いて、 $0 = \mathbf{0}^\top \mathbf{x} \leq \mathbf{y}^\top A\mathbf{x} = \mathbf{y}^\top \mathbf{b}$ が得られる。すなわち 2 の二つ目の条件 $\mathbf{y}^\top \mathbf{b} < 0$ は成り立たない。よって 1 が成り立つとき 2 は成り立たない。

逆に、1 が成り立たないとする。集合 S として $S := \{\mathbf{y} | \mathbf{y} = A\mathbf{x}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}\}$ を考える。 S は凸集合であり、また $\mathbf{0} \in S$ である。1 が成り立たないので $\mathbf{b} \notin S$ である。超平面分離定理の補題 (定理 6.3) より、ベクトル \mathbf{v} と実数 a が存在し、任意の S の元 $\mathbf{p} \in S$ について $\mathbf{v}^\top \mathbf{p} \geq a$ かつ $\mathbf{v}^\top \mathbf{b} < a$ が成り立つように出来る。我々は、この \mathbf{v} が、実は 2 が存在を主張する \mathbf{y} であることを示す。

まず $\mathbf{0} \in S$ より $0 \geq a$ が得られるので、2 の二つ目の条件 $\mathbf{v}^\top \mathbf{b} < a \leq 0$ が成り立つ。

また、 $\mathbf{v}^\top \mathbf{p}$ ($\mathbf{p} \in S$) は下限を持つので、 $\mathbf{v}^\top \mathbf{p}' < 0$ となるような $\mathbf{p}' \in S$ は存在しない⁷⁵。そのため任意の $A\mathbf{x} = \mathbf{p} \in S$ について $\mathbf{v}^\top A\mathbf{x} = \mathbf{v}^\top \mathbf{p} \geq 0$ が言える。 \mathbf{x} は任意なので、これが成り立つには $\mathbf{v}^\top A \geq \mathbf{0}^\top$ 、すなわち 2 の一つ目の条件が成り立つ必要がある⁷⁶。 □

⁷⁵もし $\mathbf{v}^\top \mathbf{p}' < 0$ となるような $\mathbf{p}' \in S$ が存在したとすると、任意の $k > 0$ について $\mathbf{p} = k\mathbf{p}' \in S$ なので、 $\mathbf{v}^\top \mathbf{p}$ は下限を持たなくなってしまう。

⁷⁶ \mathbf{x} として単位ベクトル \mathbf{e}^i (i 番目の成分のみ 1、他は 0 であるベクトル) をとれば、 $\mathbf{v}^\top A$ の i 番目の成分が非負であることが言える。

この定理の条件1を、等式 $Ax = b$ から不等式 $Ax \leq b$ に変更してみよう。一見するとだいぶ複雑になったように見えるが、これは

$$\text{非負の } 2n \text{ 次元ベクトル } \begin{pmatrix} x \\ z \end{pmatrix} \geq 0 \text{ が存在し、} (A \ I) \begin{pmatrix} x \\ z \end{pmatrix} = b \text{ が成り立つ}$$

という条件と等価である。この事実に着目することにより、ファークス・ミンコフスキーの補題 (定理 6.6) から以下が得られる。

定理 6.7. 任意の $m \times n$ 実行列 A と n 次元実ベクトル b について、必ず以下の一方のみが成り立つ。

1. 非負の n 次元ベクトル $x \geq 0$ が存在し、 $Ax \leq b$ が成り立つ。
2. m 次元ベクトル $y \geq 0$ が存在し、 $y^T A \geq 0^T$ かつ $y^T b < 0$ が成り立つ。

[6-2]. 定理 6.7 を示せ。特に2に $y \geq 0$ という条件が追加されていることに注意すること。

ではいよいよ強双対定理の証明に進もう。

強双対定理 (定理 6.5) の証明. 線形計画問題の主問題 (6.6) の最適値を s とする。

$$s = \min_x c^T x \quad \text{s.t. } x^T A \geq b^T, \quad x \geq 0 \quad (6.13)$$

ただし A は a_i たちを並べた行列 $A := (a_1 \ a_2 \ \dots \ a_m)$ であり、 $b = (b_1 \ b_2 \ \dots \ b_m)$ は m 次元ベクトルである⁷⁷。弱双対定理 (6.8) により、双対問題の拘束の下で $s - \sum_{i=1}^m b_i y_i \geq 0$ が成り立つことは分かっており、その等号を達成する組が存在することを示したい。なので $s - \sum_{i=1}^m b_i y_i \leq 0$ となる組 y が存在することが言えればよい。これを言うには、

$$\begin{pmatrix} c \\ -s \end{pmatrix} \geq \begin{pmatrix} A \\ -b^T \end{pmatrix} y \quad (6.14)$$

を満たす非負の m 次元ベクトル $y \geq 0$ の存在を示せばよい。ただし $\begin{pmatrix} c \\ -s \end{pmatrix}$ は $n+1$ 次元ベクトル、 $\begin{pmatrix} A \\ -b^T \end{pmatrix}$ は $(n+1) \times m$ 行列である。

主張に反し、式 (6.14) を満たす $y \geq 0$ が存在しなかったとして矛盾を導こう。定理 6.7 より、ある $m+1$ 次元ベクトル $z = \begin{pmatrix} z' \\ z_{m+1} \end{pmatrix} \geq 0$ が存在し、 $z^T \begin{pmatrix} A \\ -b^T \end{pmatrix} \geq 0^T$ かつ $z^T \begin{pmatrix} c \\ -s \end{pmatrix} < 0$ を満たす。ただし z の最初の m 成分を束ねて z' と置いた。以下 $z_{m+1} = 0$ の場合と $z_{m+1} \neq 0$ の場合とで場合分けする。

$z_{m+1} = 0$ の場合、 $z^T A \geq 0^T$ かつ $z^T c < 0$ を満たすベクトル $z \geq 0$ が存在することになる。すると定理 6.7 より、 $Ay \leq c$ を満たす $y \geq 0$ は存在しない。しかしこれは双対問題 (6.7) が許容解を持つという仮定に矛盾する。

$z_{m+1} \neq 0$ の場合、 z を定数倍しても関係式に影響はない⁷⁸ ので、 $z_{m+1} = 1$ とし一般性を失わない。このとき $z'^T A - b^T \geq 0^T$ かつ $z'^T c < s$ を満たす $z' \geq 0$ が存在することになる。しかしこれは、主問題 (6.6) について $x = z'$ と置けば、 $c^T x$ が s よりも小さい値をとることを意味しており、これは s がこの問題の最小値であることに矛盾する。

よってどちらの場合も矛盾が導かれたので、元の仮定が誤りであり、式 (6.14) を満たす $y \geq 0$ は存在する。□

⁷⁷この表示では、 $a^T x \geq b_i$ を転置したうえで並べている。

⁷⁸2つの式 $z^T \begin{pmatrix} A \\ b^T \end{pmatrix} \geq 0^T$ と $z^T \begin{pmatrix} c \\ -s \end{pmatrix} < 0$ はともに右辺がゼロなので、全体を定数倍することができる。

6.4 <補論>：超平面分離定理の証明

以下、定理 6.3 の証明を与える。

そのために、原点を内部に含む閉凸集合 S に対し、以下のゲージ関数

$$p(\mathbf{x}) := \arg \min_r \left(\frac{\mathbf{x}}{r} \in S \right) \quad (6.15)$$

を定義する。右辺は「 \mathbf{x}/r が S に含まれるようになる最小の r 」という意味である。明らかに、 $\mathbf{x} \in S$ ならば $r \leq 1$ 、 $\mathbf{x} \notin S$ ならば $r > 1$ となる。また、 $\mathbf{x}/r \in S$ 、 $\mathbf{y}/s \in S$ のとき、 S の凸性より

$$\frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{r + s} = \frac{r}{r + s} \frac{\mathbf{x}}{r} + \frac{s}{r + s} \frac{\mathbf{y}}{s} \in S \quad (6.16)$$

なので、 p は「劣加法的 (subadditive)」

$$p(\mathbf{x} + \mathbf{y}) \leq p(\mathbf{x}) + p(\mathbf{y}) \quad (6.17)$$

であることも分かる⁷⁹。

定理 6.3 を示すには、以下が示せれば十分である。

定理 6.8 (ハーン・バナッハの定理 (Hahn-Banach theorem)). V をベクトル空間、 W をその部分ベクトル空間とする。 F を $V \rightarrow \mathbb{R}$ の劣加法的な同次関数⁸⁰とする。また g を $W \rightarrow \mathbb{R}$ の線形関数とし、任意の $\mathbf{x} \in W$ について

$$g(\mathbf{x}) \leq F(\mathbf{x}) \quad (6.18)$$

が成り立つとする。このとき、 V 上の線形関数 G が存在し、 W 上では g と一致し ($\mathbf{x} \in W$ ならば $g(\mathbf{x}) = G(\mathbf{x})$)、さらに V 全域で

$$G(\mathbf{x}) \leq F(\mathbf{x}) \quad (6.19)$$

が満たされるものが存在する。

要するに、制限された空間 W 内で線形関数 g が劣加法関数 F によって上から押さえられているのならば、その大小関係を維持したまま、 g を W の外側にまで適切に拡張することができるということである。通常、ハーン・バナッハの定理というと無限次元空間を考えて議論するが、ここではその簡単な場合である有限次元空間の場合に限って証明を行う⁸¹。

証明. W と V の次元の差が 1 である場合について証明すれば十分である (あとは帰納的に手続きを繰り返せばよいので)。

$\mathbf{u} \notin W$ を固定する。 V の任意の元 \mathbf{x} は、適切な $\mathbf{w} \in W$ と $t \in \mathbb{R}$ を用いて $\mathbf{x} = \mathbf{w} + t\mathbf{u}$ と書ける。 $G(\mathbf{x})$ の値は、 $c := G(\mathbf{u})$ と置くと、 G の線形性より

$$G(\mathbf{x}) = G(\mathbf{w}) + tG(\mathbf{u}) = g(\mathbf{w}) + tc \quad (6.20)$$

と書ける。よって線形関数 G を求める問題は、実数 c を定める問題に帰着する。

課されている条件 (6.19) は、

$$g(\mathbf{w}) + tc \leq F(\mathbf{w} + t\mathbf{u}) \quad (6.21)$$

という条件となる⁸²。 $t \geq 0$ の場合、式 (6.21) の両辺を t で割り、 $\boldsymbol{\eta} := \mathbf{w}/t$ と置くと

$$c \leq F(\boldsymbol{\eta} + \mathbf{u}) - g(\boldsymbol{\eta}) \quad (6.22)$$

⁷⁹式 (6.16) は、 $p(\mathbf{x}) = r$ 、 $p(\mathbf{y}) = s$ のとき $\frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{r + s} \in S$ であることを主張するので、ここから $p(\mathbf{x} + \mathbf{y}) = \arg \min_t \left(\frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{t} \in S \right) \leq r + s$ がいえる。

⁸⁰ $F(a\mathbf{x}) = aF(\mathbf{x})$ が成り立つということ

⁸¹無限次元の場合も、証明の本質はほぼ同じである。

⁸²この式 (6.21) が任意の $\mathbf{w} \in W$ で満たされるような c の存在を示せればよい。

という条件が得られる。 $t < 0$ の場合、式 (6.21) の両辺を $-t$ で割り、 $\xi := -\mathbf{w}/t$ と置くと

$$c \geq g(\xi) - F(\xi - \mathbf{u}) \quad (6.23)$$

という条件が得られる。もし任意の η と ξ に対し

$$g(\xi) - F(\xi - \mathbf{u}) \leq F(\eta + \mathbf{u}) - g(\eta) \quad (6.24)$$

が満たされることを示せば、任意の η と ξ に対し式 (6.22) と式 (6.23) をともに満たすような c が存在するといえる⁸³。なので式 (6.24) を示せばよい。

式 (6.24) は移項すれば

$$g(\xi) + g(\eta) \leq F(\xi - \mathbf{u}) + F(\eta + \mathbf{u}) \quad (6.25)$$

と書けるので、これを任意の $\eta, \xi \in W$ に対して示せばよい。ところで g の線形性及び式 (6.18) の仮定より、この左辺は

$$g(\xi) + g(\eta) = g(\xi + \eta) \leq F(\xi + \eta) \quad (6.26)$$

と評価できる。さらに F の劣加法性より

$$F(\xi + \eta) \leq F(\xi - \mathbf{u}) + F(\eta + \mathbf{u}) \quad (6.27)$$

が言える。これらをつなぎ合わせることで式 (6.25) が得られる。よって示された。□

なお、ハーン・バナッハの定理を用いれば、定理 6.3 は以下のように簡単に示せる。

定理 6.3 の証明. 部分ベクトル空間 W として、一次元空間 $W := \{\mathbf{x} | \mathbf{x} = k\mathbf{y}, k \in \mathbb{R}\}$ を選ぶ。 W の任意の元 \mathbf{x} は $\mathbf{x} = k\mathbf{y}$ の形で書けるが、この k を用いて線形関数 g を $g(\mathbf{x}) = k$ と定義する。さらに、劣加法関数 F として、式 (6.15) で定義されたゲージ関数 $p(\mathbf{x})$ をとる。すると、 \mathbf{y} が S の外側にあるという条件より、 W 上においては $g(\mathbf{x}) \leq p(\mathbf{x})$ が常に成り立つ。

ハーン・バナッハの定理を適用すると、 V 全域で $G(\mathbf{x}) \leq p(\mathbf{x})$ を満たす線形関数 $G(\mathbf{x}) : V \rightarrow \mathbb{R}$ が得られる。 $G(\mathbf{x}) = 1$ の面が求めたい超平面である。□

6.5 <補論>：半正定値計画問題とサポートベクターマシン

線形計画問題をさらに一般化させた最適化問題として「半正定値計画問題」というものがある。線形計画問題では拘束条件は一次の式であったが、半正定値計画問題では拘束条件は二次の式で与えられる。

定義 6.5 (半正定値計画問題 (semidefinite programming problem)). A_1, \dots, A_m, C は実対称行列、 b_1, \dots, b_m は実数で、これらが与えられているとする。半正定値計画問題は

$$\min_{\mathbf{x}} \mathbf{x}^\top C \mathbf{x}, \quad \text{s.t. } \mathbf{x}^\top A_i \mathbf{x} \geq b_i \quad (6.28)$$

という最適化問題である⁸⁴。ただし \mathbf{x} は実ベクトルである。

線形計画問題との類似性を見るには、 $X = \mathbf{x}\mathbf{x}^\top$ と置くとよい。すると X を実対称行列として

$$\min_X \text{Tr}[CX], \quad \text{s.t. } \text{Tr}[A_i X] \geq b_i, \quad X \geq O \quad (6.29)$$

とすると、その構造が似通っていることが分かるだろう。ただし $X \geq O$ は X が半正定値であることを意味している。

⁸³あるいは $\max_{\xi} [g(\xi) - F(\xi - \mathbf{u})] \leq \min_{\eta} [F(\eta + \mathbf{u}) - g(\eta)]$ が満たされること、と言った方が分かりやすいかもしれない。もしこの不等式が成り立つなら、 $c = (\max_{\xi} [g(\xi) - F(\xi - \mathbf{u})] + \min_{\eta} [F(\eta + \mathbf{u}) - g(\eta)]) / 2$ ととればよい。

⁸⁴拘束条件に \mathbf{x} の一次の項が含まれていてもよい。

定理 6.9 (半正定値計画問題の弱双対定理). 式 (6.29) の双対問題を

$$\max_{y_1, \dots, y_m, \geq 0} \sum_{i=1}^m b_i y_i \quad \text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^m y_i A_i \leq C \quad (6.30)$$

で定義する。

主問題、双対問題それぞれの許容解に対し

$$\text{Tr}[CX] - \sum_{i=1}^m b_i y_i \geq 0 \quad (6.31)$$

が成り立つ

線形計画問題の場合と同様に、これにより最適解の候補 X' が確かに最適解であることの確認ができる。

証明. 双対問題式 (6.30) の拘束条件に右から X を掛けてトレースをとることで

$$\text{Tr}[CX] \geq \sum_{i=1}^m y_i \text{Tr}[A_i X] \geq \sum_{i=1}^m y_i b_i \quad (6.32)$$

が成り立つことから示せる。ただし 2 つ目の不等式は主問題の拘束条件を用いている。□

線形計画問題の場合と同様に、半正定値計画問題においても、等号達成が実際になされるという強双対定理も示されている。ここでは証明は省略し結果のみ紹介する⁸⁵。

定理 6.10 (半正定値計画問題の強双対定理). 半正定値計画問題において、主問題が $X > O$ (正定値) の許容解を持ち、双対問題が (等号のない) $\sum_{i=1}^m y_i A_i < C$ を満たす許容解を持つとする。さらに最大値・最小値の発散は起きないとする。このとき、主問題の最小値と双対問題の最大値は一致する。

半正定値計画問題の応用として、データ分類とサポートベクターマシンの話を見よう。「与えられた手書きの数字を 0~9 に分類する」「動物の写真を見て、それが何の動物か分類する」「正しいメールとスパムメールを識別する」のような分類 (classification) のタスクは、機械学習への応用もよくなされている情報科学の重要な課題である。ここでは特にもっとも簡単な場合として、入力を二通りのラベルに分類し、しかもその分類が超平面 (一次関数) で完璧に行える状況を考えることにしよう⁸⁶。

一つの入力は、 d 個の実数の組で指定されているものとする。 i 番目の入力データは、 d 次元ベクトル x_i で与えられる。各入力へのラベルは ± 1 の二値とし、 i 番目の入力のラベルを t_i と書く。例えば図 11 上のように、赤が $+1$ 、青が -1 の入力であり、この二つが平面 (直線) で分離出来る状況を考える。

入力を分離する平面 (直線) は多数存在する (図 11 下) が、「よい分離」の基準として「分離平面と、その平面に最も近い入力データ点までの距離が最大化されている」という基準を使うことにしよう。例えば、図 11 左や図 11 中央のような平面よりも図 11 右のような平面の方を「よりよい分離」とみなすということである。分離平面と最も近いデータ点との間の距離を「マージン (margin)」と呼ぶ。この基準は「マージン最大化 (margin maximization)」と呼ばれている。マージン最大化で分離平面を学習していく方法を「サポートベクターマシン (support vector machine)⁸⁷」といい、機械学習では基本的な手法の一つとなっている。

⁸⁵ 証明を知りたい人は、適当な最適化問題・線形計画問題の教科書を見ていただきたい。

⁸⁶ もちろん実際のカテゴリ分類問題では、分離は平面よりも複雑な関数で行われることが多く、またノイズがあるため分離は完璧ではない状況を取り扱わないといけない。ここで考えているのは極めて理想的かつ単純化された状況である。

⁸⁷ 分離平面の詳細は、分離平面に近いごく少数のデータ点にのみ依存している。このデータ点を「サポートベクター」ということから、この名前がついている。

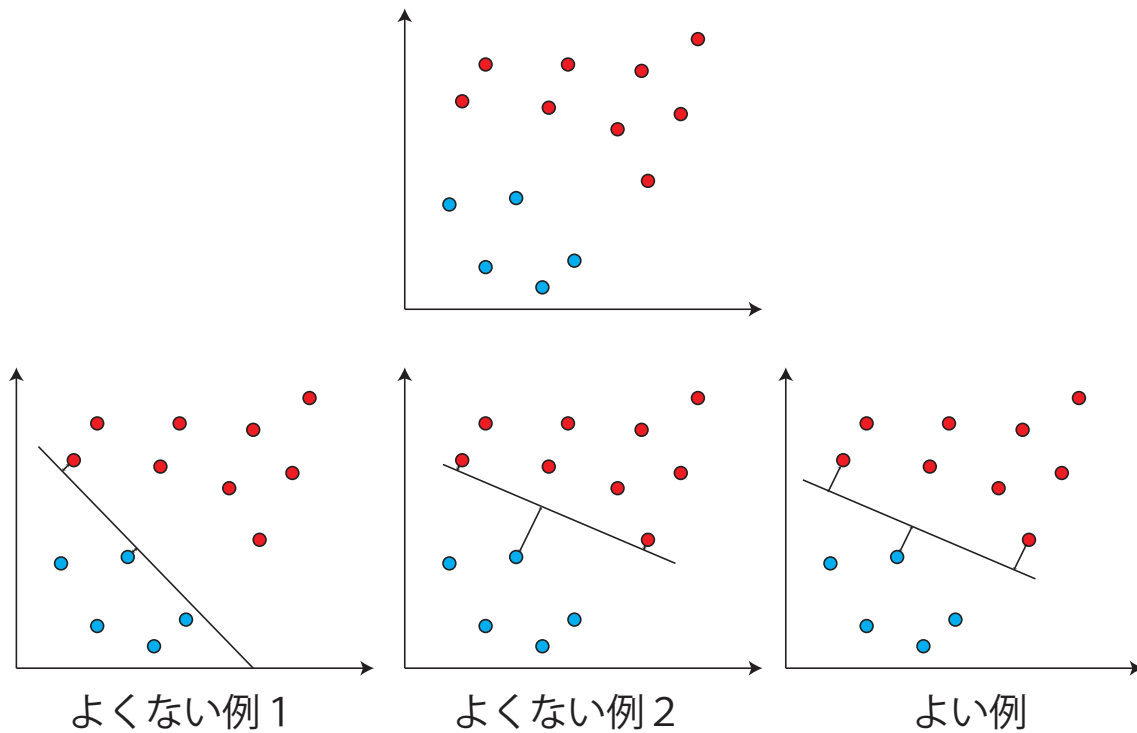


図 11: 上: 分類のタスクの例。赤と青のデータ点を分離する直線を探す。下左: よくない分類例 1. 分離平面とデータ点が近い。下中央: よくない分類例 2. 分離平面が赤のデータ点に寄りすぎている。下右: よい分類例。赤と青、データ点とからの分離平面までの距離が大きくとれている。

分離平面の式を $\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b = 0$ とすると、 i 番目のデータ点とこの平面との間の距離は

$$d_i = \frac{t_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b)}{|\mathbf{w}|} \quad (6.33)$$

と書ける。ただし $+1$ のデータ点の方が分離平面の上側にあるとした。この分離平面におけるマージンを M とすると、

$$d_i = \frac{t_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b)}{|\mathbf{w}|} \geq M \quad (6.34)$$

がすべての i で満たされる。我々の課題は、 M を最大化するような \mathbf{w}, b を探すことである。

ここで、 \mathbf{w} と b をともに定数倍しても左辺は変わらないという事実に着目すると、特に $|\mathbf{w}| = \frac{1}{M}$ としても一般性を失わない。すると、式 (6.34) は

$$t_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b) \geq 1 \quad (6.35)$$

と書き直すことができ、これが拘束条件となる。最大化すべき M の情報は \mathbf{w} のノルムの情報に押し込まれており、 $|\mathbf{w}|^2 = \frac{1}{M^2}$ を最小化する最適化問題となる。これは、以下の半正定値計画問題

$$\min_{\mathbf{w}, b} \mathbf{w}^\top \mathbf{w} \quad \text{s.t.} \quad t_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b) \geq 1 \quad (6.36)$$

と同じであり、半正定値計画問題はすでにみたように取り扱いがよく分かっているので、これも同様に解くことができる。

7 majorization と確率行列

この章では、行列及びベクトルは実成分のものを考える⁸⁸。

7.1 majorization

ここでは、二つの実ベクトル間の関係である majorization⁸⁹ を導入しよう。majorization を定義するため、 n 次元実ベクトル \mathbf{x} に対し、その成分を入れ替えて降順にしたベクトル \mathbf{x}^\downarrow ($x_1^\downarrow \geq x_2^\downarrow \geq \dots \geq x_n^\downarrow$) を導入する⁹⁰。昇順にしたものは同様に \mathbf{x}^\uparrow ($x_1^\uparrow \leq x_2^\uparrow \leq \dots \leq x_n^\uparrow$) と書く。

定義 7.1 (majorization). 二つの n 次元実ベクトル \mathbf{x} と \mathbf{y} が

$$\sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i \quad (7.1)$$

を満たしており、さらに任意の $1 \leq m \leq n$ について

$$\sum_{i=1}^m x_i^\downarrow \leq \sum_{i=1}^m y_i^\downarrow \quad (7.2)$$

が満たされるとき、 \mathbf{y} は \mathbf{x} を「majorize する」といい⁹¹、 $\mathbf{x} \prec \mathbf{y}$ と書く。

majorization は、ベクトル \mathbf{x} のラベル (x_i の添え字 i の部分) は重要ではなく、ベクトルの各成分に値がどのように分布しているのかだけが関心事である場合に、有用な比較基準となる。例えば熱統計力学においては、状態分布がどれだけ「乱雑に近いか」を特徴づけている⁹²。量子情報におけるリソース理論では、与えられた量子状態からどれだけエンタングルメントを取り出せるか、という問題が majorization の言葉で記述される⁹³。情報理論では、統計的な推定・決定の問題における「情報の多さ」の比較のために majorization が用いられる。また経済学においては、財の分配の不平等性の特徴づけ (ジニ係数など) においてこうした考え方が用いられる。

いくつか具体例を見ておこう。まず、 $\sum_i p_i = 1$ と規格化されている確率分布のベクトルについて

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{n} \\ \frac{1}{n} \\ \vdots \\ \frac{1}{n} \end{pmatrix} \prec \mathbf{p} \prec \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (7.3)$$

という関係が成り立つ。また例えば、以下は majorize する関係にある二つのベクトルである。

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \prec \begin{pmatrix} \frac{5}{8} \\ \frac{1}{8} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix} \quad (7.4)$$

⁸⁸ この章の執筆にあたり、Bhatia, "Matrix analysis", Springer, Sec.II、山本哲郎『行列解析ノート』サイエンス社、第 2 章などを参照している。

⁸⁹ 日本語訳がない (カタカナで「メジャライゼーション」と書くぐらい?) ので、ここでは英語のままにする。

⁹⁰ つまり、 $1 \sim n$ 上の適切な置換 π が存在し、 $x_i = x_{\pi(i)}^\downarrow$ を満たすということである。

⁹¹ 英語だと「 \mathbf{x} は \mathbf{y} に majorize される (\mathbf{x} is majorized by \mathbf{y})」という言い方をすることも多い。

⁹² 詳細は補論で議論する。

⁹³ 例えば M. ニールセン、I. チャン『量子コンピュータと量子通信』の第 12 章 (第 3 巻) に関連する記述がある。

これは

$$\frac{1}{2} \leq \frac{5}{8} \tag{7.5}$$

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{3} \leq \frac{5}{8} + \frac{1}{4} \tag{7.6}$$

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{6} = \frac{5}{8} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8} = 1 \tag{7.7}$$

が成り立つことから確認できる。一方、以下は互いに一方が他方を majorize する関係にはない⁹⁴。

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \not\prec \begin{pmatrix} \frac{5}{9} \\ \frac{2}{9} \\ \frac{2}{9} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \frac{5}{9} \\ \frac{2}{9} \\ \frac{2}{9} \end{pmatrix} \not\prec \begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \tag{7.8}$$

これは、

$$\frac{1}{2} \leq \frac{5}{9} \tag{7.9}$$

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{3} \geq \frac{5}{9} + \frac{2}{9} \tag{7.10}$$

という関係から確認できる。

\mathbf{x} が確率ベクトル、すなわち全成分が非負 ($x_i \geq 0$) かつ和が 1 ($\sum_{i=1}^n x_i = 1$) であるときには、「ローレンツカーブ (Lorenz curve)⁹⁵」が有用である。ローレンツカーブは、原点 (0,0) から (1,1) に向けて、点 $(\frac{m}{n}, \sum_{i=1}^m x_i^\downarrow)$ ($m = 1, 2, \dots, n-1$) を結んで作られる折れ線である⁹⁶ (図 12)。構成により、すべてのローレンツカーブは直線 $y = x$ より上部を通る。また、majorization の定義から直ちにわかるように、 $\mathbf{x} \prec \mathbf{y}$ のとき、またそのときに限り、 \mathbf{y} のローレンツカーブはすべての場所で \mathbf{x} のローレンツカーブの上部にある。これは majorization の視覚的に分かりやすい定義でもある。

ローレンツカーブは、確率分布が不均一な (大きな値と小さな値がともにある) ほど上に出っ張り、均一に近いほど $y = x$ に近づく。物理や情報の観点からいうと、確率混合を行うほど上の出っ張りがなくなって $y = x$ に近づいてくると理解できる。

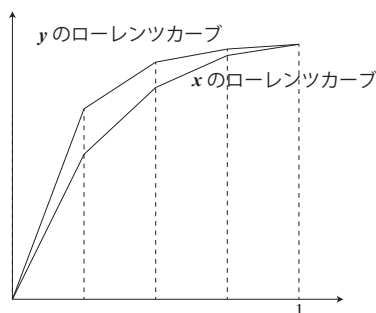


図 12: ローレンツカーブの具体例およびそれと majorization との関係。 $\mathbf{x} \prec \mathbf{y}$ であることは、 \mathbf{y} のローレンツカーブが全域で \mathbf{x} のローレンツカーブよりも上にあることと等価である。

[7-1]. 確率ベクトル $\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$ が、 $\begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$ を majorize することもされることもない条件を求めよ。

⁹⁴一般の二つのベクトル \mathbf{x}, \mathbf{y} の間には、一方が他方を majorize する関係にはない。ただし、もし $\mathbf{x} \prec \mathbf{y}$ かつ $\mathbf{y} \prec \mathbf{z}$ ならば、 $\mathbf{x} \prec \mathbf{z}$ が成り立つ。すなわち、majorization の関係は推移率を満たす。majorization は順序ではなく半順序をなしている。

⁹⁵ローレンツカーブは、経済学者 Max Lorenz にちなんで名付けられたものである。ローレンツカーブやローレンツ変換の Hendrik Lorentz とも、ローレンツゲージの Lutvig Lorenz とも、カオスのローレンツアトラクタの Edward Lorenz とも関係ない。

⁹⁶経済学においては、これを 180 度回転させた形で用いることが多い。そうすると、すべてのローレンツカーブは $y = x$ の下部を通る。

さて、二つのベクトルの和が一致するという条件 (7.1) が満たされているならば、majorization の条件式 (7.2) は、任意の $1 \leq m \leq n$ について

$$\sum_{i=1}^m y_i^\uparrow \leq \sum_{i=1}^m x_i^\uparrow \quad (7.11)$$

が成り立つという条件に置き換えても等価な定義を与える。しかしこの等価性は、式 (7.1) が満たされない場合にはもはや成り立たない。そのため、以下の二つの majorization 的な関係が定義できる。

定義 7.2. 条件 (7.1) を満たさない、つまり一般に $\sum_{i=1}^n x_i \neq \sum_{i=1}^n y_i$ である、二つの n 次元実ベクトル x, y を考える。条件式 (7.2) が任意の $1 \leq m \leq n$ で成り立つとき、 y は x を「submajorize する」といい、 $x \prec_w y$ と書く⁹⁷。同様に、条件式 (7.11) が任意の $1 \leq m \leq n$ で成り立つとき、 y は x を「supermajorize する」といい、 $x \prec^w y$ と書く。

さて、majorization と等価な特徴づけはいくつか知られている。その一つに、絶対値を用いた特徴づけがある。以下、関数 $|\cdot|^+$ を

$$|x|^+ := \begin{cases} x & : x \geq 0 \\ 0 & : x < 0 \end{cases} \quad (7.12)$$

と定義する。

定理 7.1. x, y を二つの n 次元実ベクトルとする。

- $x \prec_w y$ の必要十分条件は、任意の実数 t について以下の不等式が成り立つことである。

$$\sum_{i=1}^n |x_i - t|^+ \leq \sum_{i=1}^n |y_i - t|^+ \quad (7.13)$$

- $x \prec^w y$ の必要十分条件は、任意の実数 t について以下の不等式が成り立つことである。

$$\sum_{i=1}^n |t - x_i|^+ \leq \sum_{i=1}^n |t - y_i|^+ \quad (7.14)$$

- $x \prec y$ の必要十分条件は、任意の実数 t について以下の不等式が成り立つことである。

$$\sum_{i=1}^n |x_i - t| \leq \sum_{i=1}^n |y_i - t| \quad (7.15)$$

$x \prec_w y$ の場合の証明を与える。他の場合も同様である。

証明. 必要性 (\Rightarrow): 与えられた t に対し、 k を $x_k^\downarrow \geq t \geq x_{k+1}^\downarrow$ となるように選ぶ⁹⁸。このとき

$$\sum_{i=1}^n |x_i - t|^+ = \sum_{i=1}^k (x_i^\downarrow - t) \leq \sum_{i=1}^k (y_i^\downarrow - t) \leq \sum_{i=1}^k |y_i - t|^+ \leq \sum_{i=1}^n |y_i - t|^+ \quad (7.16)$$

となるので、欲しい不等式が得られる。ただし最後の 2 つの不等式では $|a|^+ \geq a$ 、 $|a|^+ \geq 0$ をそれぞれ用いている。

⁹⁷ submajorization を「weak majorization」と呼ぶこともあり、 \prec_w の添え字 w はその頭文字である。

⁹⁸ $x_0 < t$ 及び $x_n > t$ の場合を扱うため、形式的に $x_0^\downarrow = \infty$ 、 $x_{n+1}^\downarrow = -\infty$ と置く。

十分性 (\Leftarrow): 与えられた m に対し、 $t = y_m^\downarrow$ とする。このとき

$$\left(\sum_{i=1}^m y_i^\downarrow\right) - my_m^\downarrow = \sum_{i=1}^n |y_i - y_m^\downarrow|^+ \geq \sum_{i=1}^n |x_i - y_m^\downarrow|^+ \geq \sum_{i=1}^m |x_i - y_m^\downarrow|^+ \geq \sum_{i=1}^m (x_i^\downarrow - y_m^\downarrow) = \left(\sum_{i=1}^m x_i^\downarrow\right) - my_m^\downarrow \quad (7.17)$$

となる。ただし最後の2つの不等式では $|a|^+ \geq 0$ 、 $|a|^+ \geq a$ をそれぞれ用いている。これが任意の m で成り立つので、 $\mathbf{x} \prec_w \mathbf{y}$ が得られる。□

[7-2]. $\mathbf{x} \prec \mathbf{y}$ の場合の証明を与えよ。ただし $\mathbf{x} \prec_w \mathbf{y}$ の場合の結果は既知として用いてよい。

証明は難しくなかったが、図形的なイメージを与えた方が理解しやすいであろう。きちんとした証明には場合分けが必要だが、ここでは特定の場合だけ考える。 n 次元確率ベクトル \mathbf{x} と \mathbf{y} のローレンツカーブに対し、そのローレンツカーブと接するような傾き nt の直線を引こう (図 13)。すると、 \mathbf{x} の切片の値は $\sum_{i=1}^n |x_i - t|^+$ になることが分かる (\mathbf{y} も同様)。そのため、 $\mathbf{x} \prec_w \mathbf{y}$ の場合に $\sum_{i=1}^n |x_i - t|^+ \leq \sum_{i=1}^n |y_i - t|^+$ が成り立つことは、図より明らかとなる。

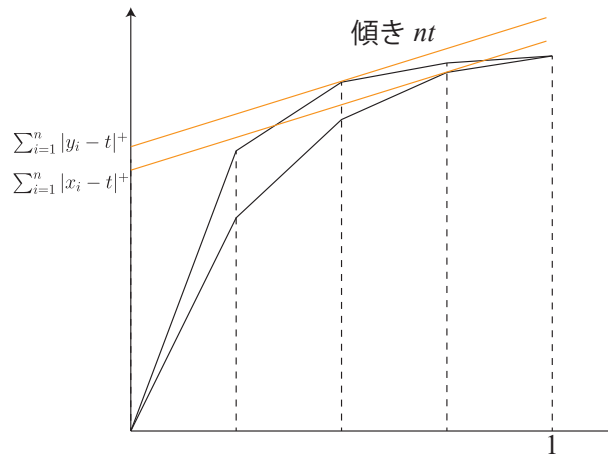


図 13: 定理 7.1 の視覚的なイメージ。 $\sum_{i=1}^n |x_i - t|^+$ 及び $\sum_{i=1}^n |y_i - t|^+$ は、図のようにローレンツカーブが接するような傾き nt の直線の切片の大きさに等しい。

7.2 二重確率行列との関係

定義 7.3 (確率行列). ある $n \times n$ 行列 A について、すべての行列成分が非負 (任意の i, j について $A_{ij} \geq 0$) であり、さらにすべての列の和が 1、つまり任意の $1 \leq i \leq n$ について

$$\sum_{j=1}^n A_{ji} = 1 \quad (7.18)$$

が成り立つとき、この行列は「確率行列 (stochastic matrix)」であるという。

定義 7.4 (二重確率行列). ある行列 A が確率行列であり、さらにすべての行の和が 1、つまり任意の $1 \leq i \leq n$ について

$$\sum_{j=1}^n A_{ij} = 1 \quad (7.19)$$

が成り立つとき、この行列は「二重確率行列 (doubly stochastic matrix)」であるという。

確率ベクトル \mathbf{p} に確率行列 A を作用させると、得られるベクトル $\mathbf{q} = A\mathbf{p}$ もまた確率ベクトルになる。

二重確率行列は、特に一様分布 $\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \frac{1}{n} \\ \vdots \\ \frac{1}{n} \end{pmatrix}$ を定常分布に持つ ($\mathbf{u} = A\mathbf{u}$)。このあたりの話は講義後半の確率過程の章で取り扱う。

二重確率行列は以下のきれいな特徴づけを持つ。

定理 7.2 (バーコフの定理 (Birkhoff's theorem)). $n \times n$ 行列 A について、以下は同値。

1. A は二重確率行列
2. A は、置換行列たちの古典確率混合として書ける。すなわち、置換行列たち $\{P_i\}$ と非負の重み c_i ($c_i \geq 0, \sum_i c_i = 1$) があり、 $A = \sum_i c_i P_i$ と書ける。

証明. $2 \Rightarrow 1$ は明らか。

$1 \Rightarrow 2$ を示す際には、『二重確率行列の集合 D 』が (行列のなす空間において) 閉凸集合であることを用いる。カラテオドリの定理 (定理 6.1) により、任意の二重確率行列は、 D の端点の古典混合で表せる。そのため、「二重確率行列の集合 D の端点はすべて置換行列である」ことを示せば、求めたい命題 2 は示されたことになる⁹⁹。すべての行列成分が 0 または 1 の二重確率行列は明らかに置換行列なので、以下では、0 でも 1 でもない行列成分を持つ二重確率行列は端点ではない (ある 2 つの二重確率行列の確率混合として書ける) ことを示す。

二重確率行列 A の行列成分 $A_{i_0 j_0}$ が 0 でも 1 でもない値をとっているとする。すると行 i_0 の規格化条件より、 j_0 とは異なる列 j_1 で、 $0 < A_{i_0 j_1} < 1$ を満たす j_1 が存在する。すると今度は列 j_1 の規格化条件より、 i_0 とは異なる行 i_1 で、 $0 < A_{i_1 j_1} < 1$ を満たす i_1 が存在する。これを繰り返して、 $A_{i_0 j_0} \rightarrow A_{i_0 j_1} \rightarrow A_{i_1 j_1} \rightarrow A_{i_1 j_2} \rightarrow \dots$ という文字列を作ることができる。

さて、 i, j としてとりうる値は高々 n 通りしかないので、この並びの中ではどこかで必ず同じ値が出現する。今、 $j_m = j_n$ ($m < n$) となったとしよう。このとき、図 14 のように「0 でも 1 でもない値をとる行列成分」をつないだループが作れる。このループに現れる行列成分を、順に「 $+\varepsilon$ する」「 $-\varepsilon$ する」と交互に変えると、 ε が十分小さければ別の二重確率行列を得ることができる。また、これの正負を入れ替えて、順に「 $-\varepsilon$ する」「 $+\varepsilon$ する」と交互に変えても、同じく二重確率行列を得ることができる。この二つの二重確率行列を $\frac{1}{2}$ ずつ確率混合したものは、元の二重確率行列 A である。よって、0 でも 1 でもない行列成分を持つ二重確率行列は端点ではないことが示された。 \square

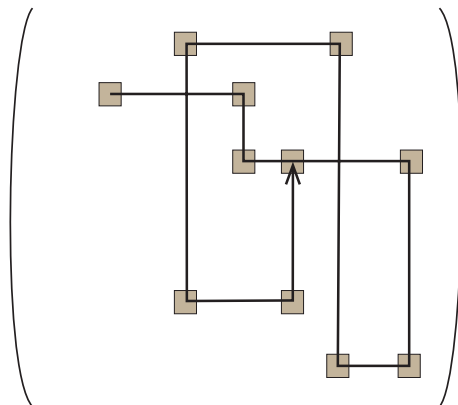


図 14: バーコフの定理の証明における「ループ」のイメージ図。一つの正方形が一つの行列要素 A_{ij} を表している。0 でも 1 でもない行列成分を縦横につないでいくことで、必ずどこかにループが出来る。

ではいよいよ、majorization に関する二重確率行列による特徴づけを行う。

⁹⁹この証明は、P. ラックス『線形代数』丸善出版、第 12 章を参照した。

定理 7.3 (定理：ハーディ・リトルウッド・ポリヤの定理 (Hardy-Littlewood-Polya theorem)). \mathbf{x}, \mathbf{y} を n 次元実ベクトルとする。このとき、以下はすべて等価。

1. $\mathbf{x} \prec \mathbf{y}$
2. 任意の下に凸な関数 $f(x)$ について、 $\sum_i f(x_i) \leq \sum_i f(y_i)$
3. ある二重確率行列 A が存在し、 $\mathbf{x} = A\mathbf{y}$ と書ける

この定理とバーコフの定理を組み合わせることで、 \mathbf{y} が majorize する ($\mathbf{x} \prec \mathbf{y}$ となる) ようなベクトル \mathbf{x} のなす集合は、置換行列 $\{P_i\}$ たちを用いて作られるベクトルたち $\{P_i\mathbf{y}\}$ を端点に持つ凸集合であると分かる。

証明. $2 \Rightarrow 1$: 任意の t について $f_t(x) = |x - t|$ は下に凸な関数なので、定理 7.1 (式 (7.15)) を用いることで示せる。

$3 \Rightarrow 2$: 凸性の性質から直ちに従う。具体的には、ジェンセンの不等式 (定理 5.7) を用いることで

$$\sum_i f(x_i) = \sum_i f\left(\sum_j A_{ij}y_j\right) \leq \sum_i \sum_j A_{ij}f(y_j) = \sum_i f(y_i) \quad (7.20)$$

と求めたい不等式が証明出来る。

$1 \Rightarrow 3$: この証明中で最も難しいパートである。色々な証明が知られている¹⁰⁰ が、ここではまず直観的にも理解しやすかつ構成的である図形的な方法を用いよう¹⁰¹。直後に超平面分離定理を用いた別証明を与える。

必要ならば $\mathbf{x} \rightarrow a\mathbf{x} + b$ $\begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$ 、 $\mathbf{y} \rightarrow a\mathbf{y} + b$ $\begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$ と変換することにより¹⁰²、 \mathbf{x}, \mathbf{y} は確率ベクトルとして

一般性を失わない。これらのローレンツカーブから、二重確率行列 A を具体的に構成する。

図 15 のように、 \mathbf{x} のローレンツカーブの辺を一本目から順に伸ばす。 \mathbf{y} のローレンツカーブと衝突したら、「元々ローレンツカーブの辺である部分」と「延長した部分」、それぞれに重なるように伸ばした線の上の部分相似縮小する。これを $n-1$ 本目の辺まで行う。このプロセスで、 \mathbf{y} のローレンツカーブの各辺 (図 15 では、1~4 本目が順に赤、緑、青、オレンジに塗られている) は分割されるが、その長さは変化しないことに注意しておく。

このプロセスが終了した際、

$$A_{ij} = \frac{\mathbf{y} \text{ のローレンツカーブの } j \text{ 番目の辺のうち、終了時に } i \text{ 番目の区間の上にいるものの長さ}}{\mathbf{y} \text{ のローレンツカーブの } j \text{ 番目の辺の長さ}} \quad (7.21)$$

と置けば、この A が確率行列であり、また $\mathbf{x} = A\mathbf{y}$ かつ $\mathbf{1} = A\mathbf{1}$ (二重確率性) を満たすことは図より確認できる¹⁰³。□

¹⁰⁰山本哲郎『行列解析ノート』サイエンス社第 2 章や R. Bhatia, "Matrix Analysis", Springer, Sec.II では、T 変換を経由した構成が示されている。

¹⁰¹ここでの証明は、拙稿で恐縮だが N. Shiraishi, "Two constructive proofs on d-majorization and thermo-majorization". J. Phys. A Math. Theor. 53 425301 (2020) の特別な場合に当たる。

¹⁰² $\begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$ は任意の二重確率行列 A の作用で自分自身に移るので、定数倍することと $\begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$ を足すこととは majorization の性質を

変えない。ローレンツカーブの上下関係も、これらの操作で変更を受けないことは容易に確認できる。

¹⁰³例えばプロセス終了時の第一区間の赤線の y 軸方向長さは $A_{11}y_1$ 、緑線の y 軸方向長さは $A_{12}y_2$ である。よって第一区間 y 方向は $x_1 = A_{11}y_1 + A_{12}y_2$ という関係を示している。同様に、赤線の x 軸方向の長さは $A_{11} \cdot \frac{1}{n}$ 、緑線の x 軸方向の長さは $A_{12} \cdot \frac{1}{n}$ である。よって第一区間 x 方向は $\frac{1}{n} = A_{11} \frac{1}{n} + A_{12} \frac{1}{n}$ という関係を示している。他の区間も同様であり、これにより $\mathbf{x} = A\mathbf{y}$ かつ $\mathbf{1} = A\mathbf{1}$ が示せる。

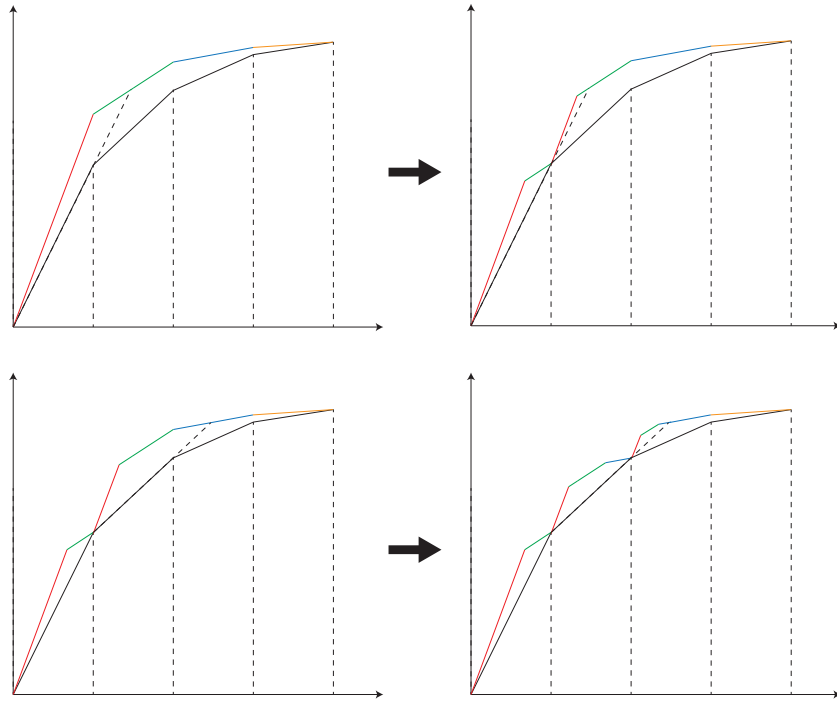


図 15: $\mathbf{x} \prec \mathbf{y}$ の場合に、 $\mathbf{x} = A\mathbf{y}$ となる二重確率行列 A を構成する方法。色ごとの線の長さは、この手続きをしていっても変化しない点に注意。

超平面分離定理を用いた $1 \Rightarrow 3$ の別証明. 超平面分離定理を用いて、 $1 \Rightarrow 3$ を背理法で証明する¹⁰⁴。

二重確率行列 T を用いて $T\mathbf{y}$ と書けるベクトルの集合を S とする。 S は閉凸集合である。 $\mathbf{x} \notin S$ として矛盾を導く。超平面分離定理により、 $\mathbf{x} \notin S$ ならば、あるベクトル \mathbf{r} が存在し、任意の $\mathbf{z} \in S$ について

$$\mathbf{r}^\top \mathbf{z} < \mathbf{r}^\top \mathbf{x} \quad (7.22)$$

と出来る。 \mathbf{r} 及び \mathbf{y} を降順に並べ替える置換行列をそれぞれ P, Q とする。 $\mathbf{x}' := P\mathbf{x}$ と置き、 \mathbf{z} として $\mathbf{z} = PQ\mathbf{y}$ を選ぶ。置換行列は $P^\top = P^{-1}$ である点に注意すると、この選択の下での式 (7.22) は

$$\mathbf{r}^\downarrow \top (\mathbf{y}^\downarrow - \mathbf{x}') < 0 \quad (7.23)$$

と言い換えられる。 \mathbf{x}' は \mathbf{x} の置換なので、 $\mathbf{x}' \prec \mathbf{y}^\downarrow$ である。

ところが、降順に並んだ任意の n 次元ベクトル \mathbf{w} について

$$\mathbf{w}^\top (\mathbf{y}^\downarrow - \mathbf{x}') = \sum_{i=1}^n w_i (y_i^\downarrow - x'_i) = \sum_{i=1}^n (w_i - w_{i+1}) \sum_{k=1}^i (y_k^\downarrow - x'_k) \geq 0 \quad (7.24)$$

が成り立つ。ただし $w_{n+1} = 0$ と形式的に置いた。これは $\mathbf{w} = \mathbf{r}^\downarrow$ とすると式 (7.23) に矛盾する。よって仮定が誤りであり、 $\mathbf{x} \in S$ である。 \square

また、この証明とほぼ同様の証明により、以下が示せる。ただしベクトルについての不等式 $\mathbf{a} \leq \mathbf{b}$ で、ベクトルの全成分 i について $a_i \leq b_i$ が成り立つということを意味する。

¹⁰⁴ この証明は、T. Sagawa, "Entropy, Divergence, and Majorization in Classical and Quantum Thermodynamics", Springer, Sec.3 を参照した。

定理 7.4. 以下は等価。

1. $\mathbf{x} \prec_w \mathbf{y}$
2. 任意の下に凸な単調増大関数 $f(x)$ について、 $\sum_i f(x_i) \leq \sum_i f(y_i)$
3. ある二重確率行列が存在し、 $\mathbf{x} \leq \mathbf{A}\mathbf{y}$ と書ける

ハーディ・リトルウッド・ポリヤの定理の 1-2 間の関係に似ている、別の結果を紹介しよう。関数 $f(x)$ と n 次元ベクトル \mathbf{x} を用いて、 $f(x_1), \dots, f(x_n)$ と並べた n 次元ベクトルを $f(\mathbf{x})$ と書くことにする。

定理 7.5. $f(x)$ は単調増大かつ下に凸な関数とする。このとき、もし $\mathbf{x} \prec_w \mathbf{y}$ ならば、 $f(\mathbf{x}) \prec_w f(\mathbf{y})$ が成り立つ。

証明. f の単調性より、 $f(\mathbf{x})$ を降順に並べた $f^\downarrow(\mathbf{x})$ の i 番目の成分は $f_i^\downarrow(\mathbf{x}) = f(x_i^\downarrow)$ である。さて、 n 次元ベクトル \mathbf{x}^\downarrow に対し、最初の k 個 $x_1^\downarrow, \dots, x_k^\downarrow$ のみを抜き出して並べた k 次元ベクトルを $\mathbf{x}^{\downarrow, [k]}$ と書くことにする。すると、 $\mathbf{x} \prec_w \mathbf{y}$ より $\mathbf{x}^{\downarrow, [k]} \prec_w \mathbf{y}^{\downarrow, [k]}$ が成り立つ。定理 7.4 の $1 \Rightarrow 2$ を用いることで、 $\sum_{i=1}^k f(x_i^\downarrow) \leq \sum_{i=1}^k f(y_i^\downarrow)$ を得る。これが任意の k で成り立つので、 $f(\mathbf{x}) \prec_w f(\mathbf{y})$ が言える。 \square

7.3 d-majorization 及び確率行列との関係

majorization の一般化である d-majorization (あるいは relative majorization¹⁰⁵) というものを導入しよう。

まずはローレンツカーブを、2つの確率分布の組 (\mathbf{p}, \mathbf{q}) に対して一般化する。 $a_i := p_i/q_i$ と定義する。このとき、 a_i を降順にするような順番に \mathbf{p}, \mathbf{q} を並べ替えたものをそれぞれ $\mathbf{p}^*, \mathbf{q}^*$ と書く。すなわち、 $p_1^*/q_1^* \geq p_2^*/q_2^* \geq \dots \geq p_n^*/q_n^*$ である。これを用いて、 $(0,0)$ と $(1,1)$ を、頂点 $(\sum_{i=1}^m p_i^*, \sum_{i=1}^m q_i^*)$ を結んで得られるのが、 (\mathbf{p}, \mathbf{q}) のローレンツカーブである (図 16)。 \mathbf{q} として一様分布 $(1/n, \dots, 1/n)^\top$ をとると、 (\mathbf{p}, \mathbf{q}) のローレンツカーブは通常の \mathbf{p} のローレンツカーブに一致する。

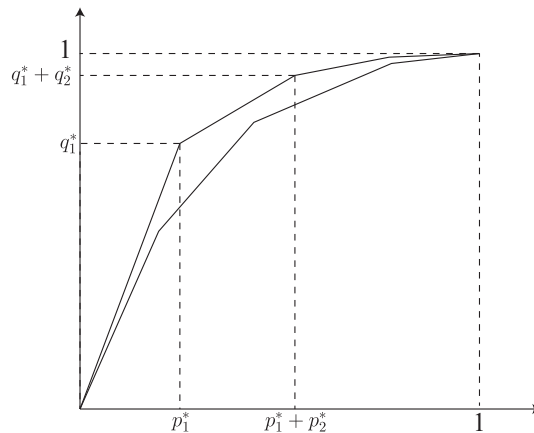


図 16: d-majorization におけるローレンツカーブ。

majorization の場合は、降順への並べ替えの下での n 個の不等式で majorization を定義し、ローレンツカーブの上下関係はそこから導かれる定理という位置づけであった。これに対し d-majorization の場合は、ローレンツカーブの上下関係自体は d-majorization の定義とする。

¹⁰⁵ 歴史的にはいろいろな呼び方で呼ばれており、特に d-majorization はもともと別の概念を指すために用いられていたこともあるので、この呼び名が妥当なのかはわかりと微妙ではある。ただ、最近は d-majorization と呼ばれることが多いので、ここでもその呼び方を用いる。

定義 7.5 (d-majorization). 2つの確率分布の組 (\mathbf{p}, \mathbf{q}) について、 (\mathbf{p}, \mathbf{q}) が $(\mathbf{p}', \mathbf{q}')$ を d-majorize することを、 $0 \leq x \leq 1$ のすべての場所で (\mathbf{p}, \mathbf{q}) のローレンツカーブが $(\mathbf{p}', \mathbf{q}')$ のローレンツカーブの上部に位置することで定義する。これを $(\mathbf{p}', \mathbf{q}') \prec (\mathbf{p}, \mathbf{q})$ と書く。

定理 7.6. 以下はすべて等価

1. $(\mathbf{p}', \mathbf{q}') \prec (\mathbf{p}, \mathbf{q})$
2. 任意の実数 t に対し、以下が成立¹⁰⁶

$$\sum_i |p'_i - tq'_i|^+ \leq \sum_i |p_i - tq_i|^+ \quad (7.25)$$

3. 任意の下に凸な関数 $f(x)$ に対し、以下が成立

$$\sum_i q'_i f\left(\frac{p'_i}{q'_i}\right) \leq \sum_i q_i f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \quad (7.26)$$

4. ある確率行列 T が存在し、 $\mathbf{p}' = T\mathbf{p}$ 、 $\mathbf{q}' = T\mathbf{q}$ と出来る。

証明. $4 \Rightarrow 3$: ジェンセンの不等式 (定理 5.7) を用いることで、以下のように直ちに導ける。

$$\sum_i q'_i f\left(\frac{p'_i}{q'_i}\right) = \sum_i q'_i f\left(\sum_k \frac{T_{ik}q_k}{q'_i} \frac{p_k}{q_k}\right) \leq \sum_{i,k} q'_i \frac{T_{ik}q_k}{q'_i} f\left(\frac{p_k}{q_k}\right) = \sum_k q_k f\left(\frac{p_k}{q_k}\right) \quad (7.27)$$

ただしジェンセンの不等式を適用するところでは $\sum_k T_{ik}q_k = q'_i$ を、最後の等式では $\sum_i T_{ik} = 1$ を、それぞれ用いている。

$3 \Rightarrow 2$: $f(x) = |x - t|^+$ と置けばよい。

$2 \Rightarrow 1$: 定理 7.1 と同様のアイデアで示せる。

$1 \Rightarrow 4$: 定理 7.3 の $1 \Rightarrow 3$ と同様のアイデアで示せる。 \square

特に \mathbf{q} として温度 T のギブス分布 (カノニカル分布) を選ぶと、d-majorization は「ギブス分布をギブス分布に移すような写像 (ギブス保存写像) で、ある状態を別の状態に移せるか」という問題と言い換えられる¹⁰⁷。これはある種「温度 T の等温環境の下での状態変換」の理論とみなすことが出来る¹⁰⁸。

¹⁰⁶今は \mathbf{p}, \mathbf{q} の総和が 1 と定まっているので、 $\sum_i |p_i - tq_i| = 2 \sum_i [|p_i - tq_i|^+ - (p_i - tq_i)] = 2(\sum_i |p_i - tq_i|^+) + t - 1$ という形で $|\cdot|$ と $|\cdot|^+$ は結びつく。なので、 $|\cdot|$ と $|\cdot|^+$ 、どちらを用いても構わない。

¹⁰⁷「量子熱力学 (quantum thermodynamics)」や「リソース理論 (resource theory)」という分野においては、このように「あるクラスの写像のみで、どの状態からどの状態に変換できるか」という問題が研究されている。

¹⁰⁸古典系においてはギブス保存写像は以下のように言い換えることができる: 対象系の状態 A から B に温度 T のギブス保存写像で変換が可能であることの必要十分条件は、「状態が温度 T のカノニカル分布である補助系 (熱浴をイメージ)」と状態が A の対象系の合成系にエネルギー保存する操作を行って、対象系の状態を B に変換出来ることである。(M. Horodecki and J. Oppenheim, *Fundamental limitations for quantum and nanoscale thermodynamics*, Nat. Comm. 4, 2059 (2013)、N. Shiraishi, "Two constructive proofs on d-majorization and thermo-majorization". J. Phys. A Math. Theor. 53 425301 (2020))

8 <補論>：固有値評価

この章では、エルミート行列の固有値を降順に並べたもの λ^\downarrow に対するさまざまな評価式を導く¹⁰⁹。

8.1 固有値の変分表示

以下の結果は基本的である。

定理 8.1. $n \times n$ のエルミート行列 A の固有値を降順に並べたものを $\lambda_1^\downarrow \geq \lambda_2^\downarrow \geq \dots \geq \lambda_n^\downarrow$ とする。固有値 λ_i^\downarrow に対応する固有状態を \mathbf{v}_i と書く。 $M_{i,j} := \text{span}(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_{i+1}, \dots, \mathbf{v}_j)$ を、 i 番目～ j 番目の固有状態で張られた $j-i+1$ 次元部分空間とする。このとき、任意の $M_{i,j}$ に含まれる長さ 1 のベクトル $\mathbf{x} \in M_{i,j}$ について、以下が成り立つ。

$$\lambda_j^\downarrow \leq \langle \mathbf{x}, A\mathbf{x} \rangle \leq \lambda_i^\downarrow \quad (8.1)$$

証明. $\mathbf{x} = \sum_{k=i}^j c_k \mathbf{v}_k$ と展開する。このとき $\langle \mathbf{x}, A\mathbf{x} \rangle = \sum_{k=i}^j |c_k|^2 \lambda_k^\downarrow$ であるが、 $\lambda_j \leq \lambda_k \leq \lambda_i$ 及び $\sum_{k=i}^j |c_k|^2 = 1$ より、求める式を得る。 \square

次の定理の証明には、本章の以降の部分で繰り返し見る技法である「次元のカウンティング」が用いられている。議論そのものは極めて単純だが、これと定理 8.1 を組み合わせることで、色々な結果が証明出来る。

定理 8.2 (クーラン・フィッシャーのミニマックス定理 (Courant-Fischer minimax theorem)). $n \times n$ のエルミート行列 A の固有値を降順に並べたものを $\lambda_1^\downarrow \geq \lambda_2^\downarrow \geq \dots \geq \lambda_n^\downarrow$ とする。また、 S_k を n 次元ベクトル空間 \mathbb{C}^n の k 次元部分空間とする。このとき、以下が成り立つ。

$$\lambda_k^\downarrow = \max_{S_k} \min_{\substack{\mathbf{x} \in S_k \\ |\mathbf{x}|=1}} \langle \mathbf{x}, A\mathbf{x} \rangle = \min_{S_{n-k+1}} \max_{\substack{\mathbf{x} \in S_{n-k+1} \\ |\mathbf{x}|=1}} \langle \mathbf{x}, A\mathbf{x} \rangle \quad (8.2)$$

証明. 一つ目の等式のみ証明する。

今、部分空間 S_k と $M_{k,n}$ の次元について

$$\dim S_k + \dim M_{k,n} = n + 1 > n \quad (8.3)$$

なので、任意の S_k について、長さ 1 のベクトル $\mathbf{y}(S_k)$ で $\mathbf{y}(S_k) \in S_k$ かつ $\mathbf{y}(S_k) \in M_{k,n}$ を満たすものが必ず存在する。これを用いて

$$\max_{S_k} \min_{\substack{\mathbf{x} \in S_k \\ |\mathbf{x}|=1}} \langle \mathbf{x}, A\mathbf{x} \rangle \leq \max_{S_k} \langle \mathbf{y}(S_k), A\mathbf{y}(S_k) \rangle \leq \max_{\mathbf{y} \in M_{k,n}} \langle \mathbf{y}, A\mathbf{y} \rangle = \lambda_k^\downarrow \quad (8.4)$$

と上から押さえられる。最後の等式は定理 8.1 による。ところが、 $S_k = M_{1,k}$ ととれば

$$\min_{\substack{\mathbf{x} \in S_k \\ |\mathbf{x}|=1}} \langle \mathbf{x}, A\mathbf{x} \rangle = \lambda_k^\downarrow \quad (8.5)$$

が成り立つ。よって式 (8.4) の等号は達成可能であり、欲しかった変分表現の式を得る。 \square

k に対する和をとることにより、以下の結果が得られる。

¹⁰⁹ この章の内容は、山本哲郎『行列解析の基礎』サイエンス社、第 6 章、Bhatia, "Matrix analysis", Springer, Sec.II, Sec.III, R. Horn and C. Johnson, "Topics in matrix analysis", Cambridge University Press, Chap. 4 などに基づく。

定理 8.3 (カイ・ファンの最大原理 (Ky Fan's maximum principle)). 設定は定理 8.2 と同じとする。このとき、以下が成り立つ。

$$\sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow = \max_{(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k)} \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{x}_i, A \mathbf{x}_i \rangle \quad (8.6)$$

ただし $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k)$ は、互いに直交する k 個の長さ 1 のベクトルの組として可能なものすべてを走るものとする。

これを利用すると、 \mathbf{x}_i として特に単位ベクトルのみをとるようにする¹¹⁰ ことにより、「 A の対角成分を並べたベクトル」は「固有値を並べたベクトル」に submajorize されるという結果

$$\begin{pmatrix} A_{11} \\ A_{22} \\ \vdots \\ A_{nn} \end{pmatrix} \prec_w \boldsymbol{\lambda} \quad (8.7)$$

が得られる。これは「シューアの定理 (Schur's theorem)」と呼ばれる。

また、

$$\max_{(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k)} \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{x}_i, (A+B) \mathbf{x}_i \rangle \leq \max_{(\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_k)} \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{y}_i, A \mathbf{y}_i \rangle + \max_{(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_k)} \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{z}_i, B \mathbf{z}_i \rangle \quad (8.8)$$

なので¹¹¹、以下の定理もカイ・ファンの最大原理から直ちに従う。

定理 8.4. 任意のエルミート行列 A, B に対し、任意の k について

$$\sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow(A+B) \leq \sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow(A) + \sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow(B) \quad (8.10)$$

これよりもさらに精度の高い「リツキーの定理」は、次の章で証明する。

8.2 行列の和の固有値

$n \times n$ エルミート行列 A, B に対し、両者の和を $C := A + B$ とする。

定理 8.5 (ワイルの不等式 (Weyl's inequality)). 上記設定の下、以下が成り立つ。

$$\lambda_i^\downarrow(A) + \lambda_j^\downarrow(B) \geq \lambda_{i+j-1}^\downarrow(C) \quad (8.11)$$

$$\lambda_i^\downarrow(A) + \lambda_j^\downarrow(B) \leq \lambda_{i+j-n}^\downarrow(C) \quad (8.12)$$

ただし一つ目の式は $i+j \leq n+1$ 、二つ目の式は $i+j \geq n+1$ の条件下とする。

¹¹⁰ これは $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k)$ の走る範囲を制限するものであり、そのため最大値は $\max_{(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k)} \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{x}_i, A \mathbf{x}_i \rangle$ と同じかそれを下回ることが分かる。

¹¹¹ $\sum_{i=1}^k \langle \mathbf{x}_i, (A+B) \mathbf{x}_i \rangle$ を最大化する $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k)$ を $(\mathbf{x}_1^*, \dots, \mathbf{x}_k^*)$ と書くと、以下のように評価できる。

$$\sum_{i=1}^k \langle \mathbf{x}_i^*, (A+B) \mathbf{x}_i^* \rangle = \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{x}_i^*, A \mathbf{x}_i^* \rangle + \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{x}_i^*, B \mathbf{x}_i^* \rangle \leq \max_{(\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_k)} \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{y}_i, A \mathbf{y}_i \rangle + \max_{(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_k)} \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{z}_i, B \mathbf{z}_i \rangle \quad (8.9)$$

証明. 一つ目の不等式のみ示す。

3つの部分空間 $M_{i,n}^A, M_{j,n}^B, M_{1,i+j-1}^{A+B}$ は、次元の和が $\dim M_{i,n}^A + \dim M_{j,n}^B + \dim M_{1,i+j-1}^{A+B} = 2n + 1 > 2n$ なので、3つの部分空間すべてに属する長さ1のベクトル \mathbf{y} が存在する。 $\mathbf{y} \in M_{i,n}^A$ より $\langle \mathbf{y}, A\mathbf{y} \rangle \leq \lambda_i^\downarrow(A)$ 、 $\mathbf{y} \in M_{j,n}^B$ より $\langle \mathbf{y}, B\mathbf{y} \rangle \leq \lambda_j^\downarrow(B)$ が得られる。一方、 $\mathbf{y} \in M_{1,i+j-1}^{A+B}$ より

$$\langle \mathbf{y}, A\mathbf{y} \rangle + \langle \mathbf{y}, B\mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{y}, C\mathbf{y} \rangle \geq \lambda_{i+j-1}^\downarrow(C) \quad (8.13)$$

が得られる。すべて組み合わせることで求める結果を得る。□

ワイルの不等式 (定理 8.5) の特殊な場合として、

$$\lambda_i^\downarrow(A) + \lambda_n^\downarrow(B) \leq \lambda_i^\downarrow(C) \leq \lambda_i^\downarrow(A) + \lambda_1^\downarrow(B) \quad (8.14)$$

という固有値の不等式評価が得られる。また、 X, Y をエルミート行列としたとき、式 (8.14) で $A = Y$ 、 $B = X - Y$ 、 $C = X$ と置くことにより

$$\max_i \left| \lambda_i^\downarrow(X) - \lambda_i^\downarrow(Y) \right| \leq \|X - Y\| \quad (8.15)$$

という評価が得られる¹¹²。これは「ワイルの摂動定理 (Weyl's perturbation theorem)」と呼ばれている¹¹³。さらに式 (8.14) の特殊な場合として、以下の定理が得られる。

定理 8.6 (ワイルの単調性定理 (Weyl's monotonicity theorem)). A, H をエルミート行列とし、さらに H は半正定値 ($H \geq 0$) とする。このとき

$$\lambda_i^\downarrow(A) \leq \lambda_i^\downarrow(A + H) \quad (8.16)$$

が成り立つ。

$A, B, A + B$ の固有値の間には、以下の submajorization の関係が成り立つ。

定理 8.7 (リツキーの定理 (Lidskii's theorem)). A, B をエルミート行列とする。このとき、以下が成り立つ。

$$\lambda^\downarrow(A + B) - \lambda^\downarrow(A) \prec_w \lambda(B) \quad (8.17)$$

左辺の $\lambda^\downarrow(A + B) - \lambda^\downarrow(A)$ は $\lambda_i^\downarrow(A + B) - \lambda_i^\downarrow(A)$ たちを並べたベクトルだが、これは必ずしも降順に並んでいるわけではない点に注意しよう。定理 8.4 (の右辺第一項を左辺に移項したもの) とリツキーの定理の左辺を比較すると

$$\sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow(A + B) - \lambda_i^\downarrow(A) \leq \sum_{i=1}^k (\lambda^\downarrow(A + B) - \lambda^\downarrow(A))_i^\downarrow \quad (8.18)$$

であり、そのためリツキーの定理の方がより強い不等式である。

証明. リツキーの定理は、任意のサイズ k の $\{1, 2, \dots, n\}$ の部分集合 S について

$$\sum_{j \in S} \lambda_j^\downarrow(A + B) - \lambda_j^\downarrow(A) \leq \sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow(B) \quad (8.19)$$

が成り立つことと等価なので、以下この不等式の証明を行う。

¹¹²得られる式は $\lambda_n^\downarrow(X - Y) \leq \lambda_n^\downarrow(X) - \lambda_1^\downarrow(Y)$ 、 $\lambda_1^\downarrow(X - Y) \leq \lambda_1^\downarrow(X) - \lambda_n^\downarrow(Y) \leq \lambda_1^\downarrow(X - Y)$ である。 $X - Y$ がエルミートなので $\|X - Y\| = \max(|\lambda_n^\downarrow(X - Y)|, |\lambda_1^\downarrow(X - Y)|)$ が成り立ち、これにより求めたかった式が得られる。

¹¹³「摂動」という名前がついているが、 Y が小さい必要はない。

必要ならば $B - \lambda_k^\downarrow(B)I$ を B と置き直すことにより、 $\lambda_k^\downarrow(B) \geq 0$ かつ $\lambda_{k+1}^\downarrow(B) \leq 0$ が成り立つとして一般性を失わない¹¹⁴。ここで、 $B = UDU^\dagger$ とユニタリ対角化されるとして、対角行列 D を対角成分が非負の部分 D_+ と対角成分が負の部分 D_- に分け ($D = D_+ + D_-$)、これに対応するように B も $B_+ = UD_+U^\dagger$ と $B_- = UD_-U^\dagger$ に分ける。構成より B_+ と $-B_-$ は半正定値であり、 B_+ の固有値は $\lambda_1^\downarrow(B), \dots, \lambda_k^\downarrow(B)$ 及び $n - k$ 個の 0 である。

ワイルの単調性定理 (定理 8.6) より $\lambda_j^\downarrow(A+B) \leq \lambda_j^\downarrow(A+B_+)$ 及び $\lambda_j^\downarrow(A+B_+) - \lambda_j^\downarrow(A) \geq 0$ が任意の j で成り立つ。よって式 (8.19) 左辺は

$$\sum_{j \in S} \lambda_j^\downarrow(A+B) - \lambda_j^\downarrow(A) \leq \sum_{j \in S} \lambda_j^\downarrow(A+B_+) - \lambda_j^\downarrow(A) \leq \sum_{j=1}^n \lambda_j^\downarrow(A+B_+) - \lambda_j^\downarrow(A) = \text{Tr}[A+B_+] - \text{Tr}[A] = \text{Tr}[B_+] \quad (8.21)$$

と評価できる。ところが、 $\text{Tr}[B_+] = \sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow(B)$ である。よって式 (8.19) が示された。□

8.3 特異値の評価

これまで示してきた固有値に対する不等式は、容易に特異値に対する不等式に拡張できる。例えば、以下の定理は定理 8.4 の特異値への拡張である。

定理 8.8. 任意の $n \times n$ 行列 A, B に対し、任意の k について

$$\sum_{i=1}^k s_i^\downarrow(A+B) \leq \sum_{i=1}^k s_i^\downarrow(A) + \sum_{i=1}^k s_i^\downarrow(B) \quad (8.22)$$

以下の証明法が雛形である。この講義では示さないが、他の様々な固有値に対する定理は、この証明法を用いることで特異値に対する定理に拡張できる¹¹⁵。

証明. 以下のような $2n \times 2n$ エルミート行列を考える。

$$\tilde{A} := \begin{pmatrix} O & A \\ A^\dagger & O \end{pmatrix} \quad (8.27)$$

$n \times n$ 行列 $A^\dagger A$ の固有値は $s_1^2(A), \dots, s_n^2(A)$ である。対応する固有ベクトルを $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ とする。これを

¹¹⁴この証明だと、どこで集合 S のサイズが k である事実を使っているか分かりにくいですが、実はこの置き換えの正当化において

$$\sum_{j \in S} \lambda_j^\downarrow(A+B) - \sum_{j \in S} \lambda_j^\downarrow(A+B - \lambda_k I) = |S| \lambda_k = k \lambda_k = \sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow(B) - \sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow(B - \lambda_k I) \quad (8.20)$$

という形で $|S| = k$ が用いられている。

¹¹⁵例えばクーラン・フィッシャーのミニマックス定理 (定理 8.2) に対応して、任意の行列 A について

$$s_k^\downarrow(A) = \max_{S_k} \min_{\substack{\mathbf{x} \in S_k \\ |\mathbf{x}|=1}} |A\mathbf{x}| = \min_{S_{n-k+1}} \max_{\substack{\mathbf{x} \in S_{n-k+1} \\ |\mathbf{x}|=1}} |A\mathbf{x}| \quad (8.23)$$

が得られる。またワイルの不等式 (定理 8.5) に対応して、任意の行列 A, B について

$$s_i^\downarrow(A) + s_j^\downarrow(B) \geq s_{i+j-1}^\downarrow(A+B) \quad (8.24)$$

$$s_i^\downarrow(A) + s_j^\downarrow(B) \leq s_{i+j-n}^\downarrow(A+B) \quad (8.25)$$

が成り立つ。ただし一つ目の式は $i+j \leq n+1$ 、二つ目の式は $i+j \geq n+1$ の条件下とする。またワイルの摂動定理 (8.15) に対応して、任意の行列 A, B について

$$\max_i |s_i^\downarrow(A) - s_i^\downarrow(B)| \leq \|A - B\| \quad (8.26)$$

成り立つ。

用いて、 \tilde{A} の固有値、固有ベクトルは

$$\begin{pmatrix} O & A \\ A^\dagger & O \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \pm s_i \mathbf{v}_i \\ A^\dagger \mathbf{v}_i \end{pmatrix} = \pm s_i \begin{pmatrix} \pm s_i \mathbf{v}_i \\ A^\dagger \mathbf{v}_i \end{pmatrix} \quad (8.28)$$

と書けることが分かる。特に \tilde{A} の正の固有値は $s_1(A), \dots, s_n(A)$ である (負の固有値は $-s_1(A), \dots, -s_n(A)$ である)。よって、 \tilde{A} に対し定理 8.4 を適用し、 $1 \leq k \leq n$ の範囲を見れば、これは求めたかった結果そのものである。□

これにより、シャッテン p-ノルムの劣加法性が証明出来る。

定理 8.9. 任意の行列 A, B と任意の $1 \leq p$ に対し、

$$\|A + B\|_p \leq \|A\|_p + \|B\|_p \quad (8.29)$$

証明. 定理 8.8 は、submajorization の関係 $\mathbf{s}^\downarrow(A + B) \prec_w \mathbf{s}^\downarrow(A) + \mathbf{s}^\downarrow(B)$ を意味する。 $f(x) = x^p$ ($1 \leq p$) は下に凸な単調増大関数なので、定理 7.4 の $1 \Rightarrow 2$ を用いることで

$$\|A + B\|_p^p = \sum_i s_i^p(A + B) \leq \sum_i (s_i^\downarrow(A) + s_i^\downarrow(B))^p \quad (8.30)$$

を得る。一方、ベクトルの p-ノルムに対する劣加法性より

$$\left[\sum_i (s_i^\downarrow(A) + s_i^\downarrow(B))^p \right]^{1/p} \leq \left[\sum_i s_i^{\downarrow p}(A) \right]^{1/p} + \left[\sum_i s_i^{\downarrow p}(B) \right]^{1/p} = \|A\|_p + \|B\|_p \quad (8.31)$$

が言える。これらより求めたかった結果を得る。□

第II部

確率論とその応用

9 確率の集中不等式

この章では、平均や分散といった量を用いて「平均から大きく外れる確率」を評価する様々な不等式を導く。特にここで得られる不等式は「平均に近い値が高い確率で出現する」ことを示すときによく用いられる。これら不等式は「集中不等式 (concentration inequality)」とも呼ばれる¹¹⁶。

9.1 モーメントとキュムラント

確率変数 X に対する、モーメントとキュムラントを導入しよう。ただし以下で、山カッコは X についての平均を表す ($\langle F(X) \rangle := \int dX P(X) F(X)$)。ただし $P(X)$ は X の確率分布)。

定義 9.1 (モーメント (Moment)). X の n 次モーメント M_n を以下で定義する。

$$M_n := \langle X^n \rangle \quad (9.1)$$

定義 9.2 (キュムラント (Cumulant)). X の n 次キュムラント C_n を以下の手続きで定義する。補助変数 s を持つ量 $\ln \langle e^{sX} \rangle$ を考え、これを s についてテイラー展開する。

$$\ln \langle e^{sX} \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{C_n}{n!} s^n. \quad (9.2)$$

右辺の C_n を X の n 次キュムラントと定義する。

キュムラントの定義はいささか込み入っており、なぜこのような量を定義したいのか、今の時点ではよく分からないかもしれないが、これが便利なのは後に明らかになる。ひとまず係数比較をすることで、1 次のキュムラントは平均と一致、2 次のキュムラントは分散と一致することが確認できる。また、(平均がゼロとは限らない) 一般のガウス分布において、3 次以上のキュムラントはすべてゼロである。

[9-1]. (平均がゼロとは限らない) ガウス分布の 3 次以上のキュムラントがゼロであることを示せ。

モーメントとキュムラントの結びつきをいくつか挙げる¹¹⁷。

$$C_1 = M_1, \quad (9.3)$$

$$C_2 = M_2 - M_1^2, \quad (9.4)$$

$$C_3 = M_3 - 3M_1M_2 + 2M_1^3, \quad (9.5)$$

$$C_4 = M_4 - 4M_3M_1 - 3M_2^2 + 12M_2M_1^2 - 6M_1^4, \quad (9.6)$$

⋮

¹¹⁶ この章の内容は、R. Vershynin, “High-Dimensional Probability”, Cambridge university press や M. J. Wainwright, “High-Dimensional Statistics”, Cambridge university press などに基づく。

¹¹⁷ 分布の高次の特徴量もいくつか定義されている。平均から見た分布の非対称度を「歪度 (skewness)」といい、平均 M_1 と分散 C_2 を用いて $\langle (X - M_1)^3 \rangle / C_2^{3/2} = C_3 / C_2^{3/2}$ で定義される。ガウス分布と比較した分布の鋭さの度合いを「尖度 (kurtosis)」といい、 $\langle (X - M_1)^4 \rangle / C_2^2 - 3 = C_4 / C_2^2 - 3$ または $\langle (X - M_1)^4 \rangle / C_2^2 = C_4 / C_2^2$ で定義される (前者はガウス分布の尖度をゼロと規格化する定義の流儀)。

9.2 マルコフ不等式とチェビシェフ不等式

まずは、基本的だが有用なモーメント・キュムラントについての不等式を導こう。以下、 $P[\sim]$ で、命題 \sim が発生する確率を表すことにする。

定理 9.1 (マルコフの不等式 (Markov inequality)). X を非負の値をとる確率変数とする。このとき、以下が成り立つ。

$$P[X \geq s] \leq \frac{\langle X \rangle}{s} \quad (9.7)$$

この式は、 $s > \langle X \rangle$ のときに有意な式である。特に $s \gg \langle X \rangle$ である場合には、 s 以上の値を X がとる確率は非常に小さいと言える。

証明. $\chi[\sim]$ を、命題 \sim が成り立つときに1、成り立たないときに0をとる指示関数 (indicator function) とする。これを用いると、

$$P[X \geq s] = \int_0^\infty dX \chi[X \geq s] P(X) \leq \int_0^\infty dX \frac{X}{s} P(X) = \frac{\langle X \rangle}{s} \quad (9.8)$$

と導ける。ただし真ん中の不等式は $\chi[X \geq s] \leq \frac{X}{s}$ が任意の X で成り立つことを用いた (図 17)。 □

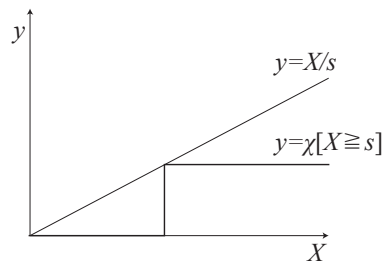


図 17: マルコフの不等式の証明の途中で用いた不等式のイメージ図。 $\chi[X \geq s] \leq \frac{X}{s}$ が任意の X で成り立つ。

マルコフの不等式は、確率変数が非負の時に、平均を用いて外れ値をとる確率を評価する不等式であった。これに対し、次に紹介するチェビシェフの不等式は、一般の確率変数が外れ値をとる確率を、分散を用いて評価する。

定理 9.2 (チェビシェフの不等式 (Chebyshev's inequality)). $\text{Var}[X]$ で確率変数 X の分散を表す。このとき

$$P[|X - \langle X \rangle| \geq s] \leq \frac{\text{Var}[X]}{s^2} \quad (9.9)$$

チェビシェフの不等式は、分散が小さいならば、確率変数 X が平均から大きく離れた値をとる確率が小さいことを主張している。

証明. マルコフの不等式において、 $(X - \langle X \rangle)^2$ を X と、 s^2 を s と置くことにより

$$P[|X - \langle X \rangle| \geq s] = P[(X - \langle X \rangle)^2 \geq s^2] \leq \frac{\langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle}{s^2} = \frac{\text{Var}[X]}{s^2} \quad (9.10)$$

と示せる。 □

9.3 モーメント法と閾値定理

マルコフの不等式やチェビシェフの不等式を利用することで、「モーメント法 (moment method)」という強力な手法が得られる¹¹⁸。モーメント法は、非負整数をとる確率変数 X について、 X がゼロをとる確率を評価する際に用いられる。以下具体例を用いて説明しよう。

n 個の頂点 (vertex/node) の「エルデシュ・レニーランダムグラフ (Erdos-Renyi random graph)」を考える (図 18)。これは、与えられた n 個の頂点に対し、 $n(n-1)/2$ 個の頂点ペアについて、与えられた確率 p で二つの頂点を辺 (edge) で結び、確率 $1-p$ で辺を置かない、という手続きで確率的に生成されるグラフである。我々は特に、 p を n のべき $p = n^a$ で変化させる場合の $n \rightarrow \infty$ 極限の振る舞いに興味がある。

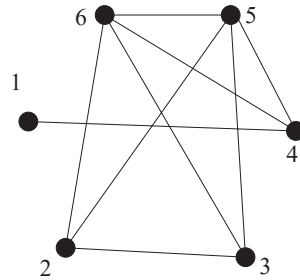


図 18: $n = 6$ の場合のエルデシュ・レニーランダムグラフの一例。このグラフでは 2356 が 4-クリークをなしている。

問題: ランダムグラフ中に「どの頂点間にも辺がある 4 つ組 (これを「4-クリーク¹¹⁹ (4-clique)」という)」が含まれるか否かを考える。 $n \rightarrow \infty$ のランダムグラフにおいて、 $a < -\frac{2}{3}$ ならば確率 1 で 4-クリークは存在せず、 $a > -\frac{2}{3}$ ならば確率 1 で 4-クリークは存在することを示せ。

つまり、4-クリークがあるかないかの境目はちょうど $p = n^{-2/3}$ のオーダー¹²⁰ であり、それより少しでも大きければほとんど確実に 4-クリークは存在せず、逆にそれより少しでも大きければほとんど確実に 4-クリークは存在するということである。クリークの有無を議論するうえで厄介なのは、可能な頂点の 4 つ組は n^4 のオーダーあるが、その多くが互いに (辺を共有しているために) 相関し合っている¹²¹ ため、単純な数え上げでは評価が難しいという点である。モーメント法は、このような問題の閾値を評価するのに有用な道具である。

X として「そのランダムグラフに含まれる 4-クリークの数」をとる。 X は非負整数をとる確率変数である。頂点の 4 つ組は全部で $\binom{n}{4} = \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{24}$ 通りあるが、これらを v でラベルする¹²²。4 つ組 v に 4-クリークがあるか否かを示す確率変数 X_v を導入する。明らかに $X = \sum_v X_v$ である。

まず $p = n^a$ ($a < -2/3$) の状況を考えよう。この際の X の期待値の漸近挙動は

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle X \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \binom{n}{4} p^6 = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{24} p^6 = 0 \quad (9.11)$$

である。よって、マルコフの不等式で $s = 1$ と選ぶと、 $n \rightarrow \infty$ において

$$P[X \geq 1] \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \langle X \rangle = 0 \quad (9.12)$$

¹¹⁸ 今回の事例は、閾値の値は直観的にも分かるような問題であった。より複雑な組合せ最適化問題については、閾値自体がそう簡単に分からないものも多く、そうした場合にも閾値を上下から評価する際にモーメント法はよく用いられる。代表的な結果として Dimitris Achlioptas, Assaf Naor, and Yuval Peres, *Rigorous location of phase transitions in hard optimization problems*, Nature volume 435, pages 759–764 (2005)

¹¹⁹ 指定の頂点同士をすべて結んだものを「クリーク」という。

¹²⁰ 係数及びサブリーディングオーダーは存在しうる。

¹²¹ 例えば、頂点 1234 と頂点 1256 を考えると、もし 12 間に辺がないのならば、1234 にも 1256 にも 4-クリークは存在しない。そのため、「1234 に 4-クリークがある確率」と「1256 に 4-クリークがある確率」は独立ではなく互いに相関している。

¹²² $n = 6$ の場合だと、 v は全部で 15 通りの値をとる。

が得られる。よって、 X が 1 以上となる確率はゼロ、つまり 4-クリーク数 X は確率 1 でゼロである。言い換えると、4-クリークは確率 1 で存在しないということである。この計算法は「一次モーメント法 (first moment method)」という。

次に $p = n^a$ ($a > -2/3$) の状況を考えよう。これを議論するために以下の「二次モーメント法」を用いる。

定理 9.3 (二次モーメント法 (second moment method)). 任意の確率変数 X について以下が成り立つ。

$$P[X = 0] \leq \frac{\text{Var}[X]}{\langle X \rangle^2} \quad (9.13)$$

証明. 見やすくするために $\mu := \langle X \rangle$ と置く。チェビシェフの不等式を用いることで、以下のように欲しい式を得る。

$$P[X = 0] \leq P[|X - \mu| \geq \mu] \leq \frac{\text{Var}[X]}{\mu^2} = \frac{\text{Var}[X]}{\langle X \rangle^2} \quad (9.14)$$

□

今回の問題においては $\langle X \rangle = O(n^4 p^6)$ と知っているので、 $p = n^a$ ($a > -2/3$) において $\text{Var}[X]$ が $O(n^8 p^{12})$ を下回ることを言えればよい。そうすれば、 $\text{Var}[X]/\langle X \rangle^2 \rightarrow 0$ より $P[X = 0]$ がゼロに収束する、つまり X は確率 1 で 1 以上であることが言える。すなわち、確率 1 で 4-クリークは存在すると言える。そのため以下では $\text{Var}[X]$ を評価する。

まず各 X_v の分散・共分散を用いて

$$\text{Var}[X] = \sum_v (\langle X_v^2 \rangle - \langle X_v \rangle^2) + \sum_{v \neq w} (\langle X_v X_w \rangle - \langle X_v \rangle \langle X_w \rangle) = \sum_v \text{Var}[X_v] + \sum_{v \neq w} \text{Cov}[X_v, X_w] \quad (9.15)$$

が得られる。ただし $\text{Cov}[XY] = \langle (X - \langle X \rangle)(Y - \langle Y \rangle) \rangle = \langle XY \rangle - \langle X \rangle \langle Y \rangle$ は X と Y の共分散¹²³ である。 $\text{Cov}[X_v, X_w]$ を評価するため、 v と w で重複している頂点の数で場合分けする。重複している頂点が 0 個または 1 個の場合には、 X_v と X_w は独立であり共分散はゼロである。重複する頂点が 2 個の場合には、1 つの辺が共有されており、今は $\langle X_v \rangle \geq 0$ なので、この場合の共分散は $\text{Cov}[X_v, X_w] \leq \langle X_v X_w \rangle = p^{11}$ と上から押さえられる。同様に重複する頂点が 3 個の場合には、3 つの辺が共有されており、同様にしてこの場合の共分散は $\text{Cov}[X_v, X_w] \leq \langle X_v X_w \rangle = p^9$ と上から押さえられる。よって、

$$\begin{aligned} \text{Var}[X] &= \sum_v \text{Var}[X_v] + \sum_{v \neq w} \text{Cov}[X_v, X_w] \\ &\leq \binom{n}{4} p^6 (1 - p^6) + \binom{n}{6} \frac{6!}{2^3} p^{11} + \binom{n}{5} \frac{5!}{3!} p^9 \\ &= O(n^4 p^6 + n^6 p^{11} + n^5 p^9) \end{aligned} \quad (9.16)$$

であり¹²⁴、これは $p = n^a$ ($a > -2/3$) のときには真に $O(n^8 p^{12})$ より小さい。よって、 $p = n^a$ ($a > -2/3$) のときには、 $X = 0$ の確率はゼロ、すなわち 4-クリークはほとんど確実に存在する。

9.4 チェルノフ限界

ここまで見たチェビシェフの不等式などは、平均して $O(1)$ となるようなまれな過程の回数を扱う「ポアソン過程¹²⁵ (Poisson process)」に対しては、あまりよいバウンドを与えてくれない。この場合には、モー

¹²³ 共分散の定義は定義 13.1 で述べているので、忘れた人は参照してほしい。

¹²⁴ ここで $\binom{a}{b}$ は ${}_a C_b = a!/b!(a-b)!$ と同じで、 a 個から b 個を選ぶ組合せを表す。 C を用いる方法は日本ではよく用いられるが、海外ではあまり用いられない。

¹²⁵ 確率変数 $S = \sum_{i=1}^N X_i$ の評価。ただし X_i は確率 $p = \frac{\alpha}{N}$ で 1、 $1-p$ で 0

メント母関数を用いた「チェルノフ限界」がよいバウンドを与える。

定理 9.4 (チェルノフ限界 (Chernoff bound)). X_i ($i = 1, \dots, N$) は互いに独立な確率変数で、その和を $S = \sum_{i=1}^N X_i$ とする。このとき、任意の a と $t > 0$ について¹²⁶以下が成り立つ。

$$P[S \geq a] \leq e^{-at} \prod_i \langle e^{tX_i} \rangle \quad (9.17)$$

$$P[S \leq a] \leq e^{at} \prod_i \langle e^{-tX_i} \rangle \quad (9.18)$$

t は任意なので、右辺を最小化するように t をとると不等式が最もタイトになる。

証明. 式 (9.17) のみ証明する。

マルコフの不等式を用いると

$$P[S \geq a] = P[e^{tS} \geq e^{ta}] \leq \frac{\langle e^{tS} \rangle}{e^{ta}} = e^{-at} \prod_i \langle e^{tX_i} \rangle \quad (9.19)$$

と求めたい不等式を得る。ただし最後の等式では X_i たちが独立であることを用いた。 \square

[9-2]. 式 (9.18) を導出せよ。

特に X_i が確率 p_i で 1、確率 $1 - p_i$ で 0 を取る場合には、

$$\langle e^{tX_i} \rangle = p_i e^t + (1 - p_i) \leq e^{(e^t - 1)p_i} \quad (9.20)$$

が成り立つので、 $a > \langle S \rangle$ の条件の下、 $t = \ln \frac{a}{\langle S \rangle}$ と選ぶことで

$$P[S \geq a] \leq \left(\frac{a}{\langle S \rangle} \right)^{-a} \prod_i e^{(a/\langle S \rangle - 1)p_i} = e^{-\langle S \rangle} \left(\frac{e \langle S \rangle}{a} \right)^a \quad (9.21)$$

という評価式が得られる。

[9-3]. チェルノフ限界の設定で、 X_i が確率 p_i で 1、確率 $1 - p_i$ で 0 を取る場合を考える。 $\mu := \langle S \rangle$ と書く。このとき、ある定数 c が存在し、任意の $0 < \delta \leq 1$ について

$$P[|S - \mu| \geq \delta \mu] \leq 2e^{-c\mu\delta^2} \quad (9.22)$$

が成り立つことを示せ。

再びエルデシュ・レニーランダムグラフの具体的問題で考えてみよう。確率 p で辺を結ぶ場合、平均次数 (頂点から出ている辺の数) は $d := (n - 1)p$ である。我々は特に $\lim_{n \rightarrow \infty} d / \ln n = \infty$ となるようなグラフ、すなわち平均次数が $\ln n$ のオーダーより大きい密な (dense) グラフ¹²⁷ を考える。

エルデシュ・レニーランダムグラフで、頂点 i の次数を d_i とする。 d_i は確率変数である。

問題: 精度 $\varepsilon > 0$ を任意に選んで固定する。 n が十分大きいならば、ほとんど確実に、得られたグラフでは (一つの例外もなく) すべての頂点が $(1 - \varepsilon)d \leq d_i \leq (1 + \varepsilon)d$ を満たすことを示せ。

¹²⁶ただし式 (9.17) の場合、 $a \leq \langle S \rangle$ と選ぶと右辺が 1 以上となって無意味な不等式になるので、実質的に意味があるのは $a > \langle S \rangle$ の場合である。式 (9.18) の場合は逆に $a < \langle S \rangle$ と選ぶ必要がある。

¹²⁷対義語は「疎な (sparse) グラフ」である。無限頂点数のランダムグラフの場合、平均次数が有限ならば疎なグラフである。ただし平均次数が発散しているならば密なグラフというかは状況次第であり、平均次数が n のオーダーならば密なグラフという場合が多いが、(ここで挙げたような) $\ln n$ オーダーより少し上のグラフまで「密なグラフ」に含めるかは状況による。

証明. まず式 (9.22) より、

$$P[|d_i - d| \geq \varepsilon d] \leq 2e^{-cd\varepsilon^2} \quad (9.23)$$

が成り立つ。ここで次のユニオンバウンドを用いる¹²⁸。

定理 9.5 (ユニオンバウンド (union bound)). A_1, \dots, A_m を、互いに独立とは限らない事象とする。このとき、以下が成り立つ。

$$P\left[\bigcup_i A_i\right] \leq \sum_i P[A_i] \quad (9.24)$$

ユニオンバウンドの証明は、ベン図を書いてみれば直ちにわかる。証明を見ると当たり前の関係式にも見えるが、独立でない事象を取り扱う際にはよく用いられる不等式である。

事象 A_i として「頂点 i の次数が $|d_i - d| > \varepsilon d$ 」を選ぶ。 $\bigcup_i A_i$ は「少なくとも一つの頂点 i ($1 \leq i \leq n$) で、頂点の次数が $|d_i - d| > \varepsilon d$ となる」という事象なので、これは我々が知りたい「(一つの例外もなく) すべての頂点の次数は $|d_i - d| \leq \varepsilon d$ 」という事象の補集合である。そのため、 $P[\bigcup_i A_i]$ が $n \rightarrow \infty$ の極限でゼロに収束することを示せばいい。ユニオンバウンドを用いると

$$P\left[\bigcup_i A_i\right] \leq \sum_i P[A_i] = \sum_i P[|d_i - d| \geq \varepsilon d] \leq 2ne^{-cd\varepsilon^2} = 2e^{(-c\varepsilon^2 d / \ln n + 1) \ln n} \quad (9.25)$$

である。右辺は $\lim_{n \rightarrow \infty} d / \ln n = \infty$ より $n \rightarrow \infty$ でゼロに収束する。よって示された。 \square

9.5 サブガウス分布とヘフディング限界

平均 a 、分散 b^2 のガウス分布に従う確率変数 X は

$$\langle e^{t(X-a)} \rangle = e^{t^2 b^2 / 2} \quad (9.26)$$

を任意の t で満たす。この事実を踏まえ、「サブガウス分布」を以下のように定義する。

定義 9.3 (サブガウス分布 (sub-Gaussian)). 平均 μ の確率変数 X がサブガウス分布¹²⁹に従うとは、ある正の実数 c が存在し

$$\langle e^{t(X-\mu)} \rangle \leq e^{t^2 c^2 / 2} \quad (9.27)$$

が任意の実数 t で満たされることをいう。

サブガウス分布は、分布のテールが何らかのガウス分布で押さえられているということを意味している。つまり、分布のテールの減衰速度は、 e^{-kx^2} の形 (k は適当な係数)、もしくはそれよりも速くないといけない。

多くのよく知られた確率変数はサブガウス分布に従う。例えば、 ± 1 を半々でとるラデマッハ変数は $c = 1$ のサブガウス分布に従う。この事実は

$$\langle e^{tX} \rangle = \frac{e^t + e^{-t}}{2} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{t^{2i}}{(2i)!} \leq \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(t^2)^i}{2^i (i)!} = e^{t^2/2} \quad (9.28)$$

と直接確認できる。

¹²⁸ 「一様限界」、あるいは「ブールの不等式 (Boole's inequality)」ともいう。

¹²⁹ 「劣ガウス分布」ともいう。

より一般に、 X が $X = 0$ で対称な確率分布 $P(X) = f(X)$ に従う場合、 X は重み $f(x)$ による $\pm x$ のラダマッハ確率変数の古典混合とみなせるので、

$$\langle e^{tX} \rangle = \int_0^\infty dx f(x) \frac{e^{xt} + e^{-xt}}{2} \leq \int_0^\infty dx f(x) e^{t^2 x^2 / 2} \quad (9.29)$$

と計算できる。そのため、 $\int_0^\infty dx f(x) e^{t^2 x^2 / 2}$ が収束するならばこれはサブガウス分布に従う。

また、確率変数 X に上限 u と下限 v がある場合には、 X は $c = u - v$ のサブガウス分布に従う。これは以下のように示せる。まずジェンセンの不等式より $e^{-\langle X' \rangle} \leq \langle e^{-X'} \rangle$ なので、これを用いると

$$\langle e^{t(X - \langle X' \rangle_{X'})} \rangle_X \leq \langle e^{t(X - X')} \rangle_{X, X'} \quad (9.30)$$

が得られる。ただしカッコの下付き添え字は、その変数について平均をとっていることを表している。最後の $\langle \cdot \rangle_{X, X'}$ は、二つの確率変数 X, X' が (X の従う) 独立同分布からサンプルされている状況での平均を表す。すると $X - X'$ は対称な分布であり、 $|X - X'| \leq u - v$ なので、式 (9.29) を用いると

$$\langle e^{t(X - X')} \rangle_{X, X'} \leq e^{t^2 (u - v)^2 / 2} \quad (9.31)$$

と上から押さえられ、 X は $c = u - v$ のサブガウス分布に従うとわかる。より精密な議論を用いると、実は X は $c = (u - v)/2$ のサブガウス分布に従うことも示せる。

[9-4]. X をサブガウス分布に従う確率変数とする。このとき、任意の $p \geq 1$ について、 p によらない定数 C が存在し

$$\langle X^p \rangle^{1/p} \leq C \sqrt{p} \quad (9.32)$$

が成り立つことを示せ。

サブガウス分布に対する有用なバウンドである「ヘフディング限界」を導こう。ヘフディング限界（やその発展版）は、情報科学、特に機械学習¹³⁰ などでは頻繁に用いられる不等式である。

定理 9.6 (ヘフディング限界 (Hoeffding bound)). X_i をパラメータ c_i のサブガウス分布に従う確率変数、 $S = \sum_i X_i$ とし、 μ を S の平均とする。このとき任意の $s \geq 0$ について以下が成り立つ。

$$P[S - \mu \geq s] \leq \exp\left(-\frac{s^2}{2 \sum_i c_i^2}\right) \quad (9.33)$$

証明. X_i の平均を μ_i とする。明らかに $\sum_i \mu_i = \mu$ である。チェルノフ限界 (9.17) において、 $a = \mu + s$ と置くと

$$P[S - \mu \geq s] \leq e^{-(\mu+s)t} \prod_i \langle e^{tX_i} \rangle \leq e^{-(\mu+s)t} \prod_i e^{t\mu_i + t^2 c_i^2 / 2} = \exp\left(-st + \frac{t^2}{2} \sum_i c_i^2\right) \quad (9.34)$$

を得る。右辺の指数の肩は $t = s / \sum_i c_i^2$ のときに最大化され、このとき

$$\exp\left(-st + \frac{t^2}{2} \sum_i c_i^2\right) = \exp\left(-\frac{s^2}{2 \sum_i c_i^2}\right) \quad (9.35)$$

である。 □

¹³⁰ 学習理論では、得られた有限個のデータで学習を行い、それで次の未知のデータに対してもよいパフォーマンスを実現しようとする (汎化)。なので、何らかのペナルティ (例えば誤差) を最小化するようなパラメータを学習で得ようとした場合、「手元の有限個のデータ (これは確率変数) で作られた誤差関数」と「真の分布による誤差関数」との間にずれがあることを考える必要が出てくる。この「得られた有限個のデータによって作られる誤差関数の期待値」と「真の分布による誤差関数の期待値」の差について、ヘフディング限界を用いることで、「ほとんどすべてのデータの出現の仕方に対し、~が成り立つ」のような評価が得られる。

10 <補論>：高次元空間の性質

この章では、高次元空間において見られる、直観に反する性質をいくつか見よう¹³¹。高次元空間は、マクロ系や多数のサンプルに対する統計処理の状態空間などで現れる。例えば1次元空間中に粒子が N 個いる系を考えると、この状態空間は \mathbb{R}^N 中の超立方体である。また、 N 個の二準位系が集まった量子系の状態空間は \mathbb{C}^{2^N} 中の超球である。こうした系の N が十分大きい場合の振る舞いは、2次元や3次元といった我々になじみのある低次元の場合のイメージとは大きく異なる場合がある。

10.1 高次元における反直観的な振る舞い

ここではいくつかの具体例を見ていく。

例1：高次元球のサンプリング：数値実験で、半径1の n 次元超球 (\mathbb{R}^n の空間中の、原点からの距離が1以下の空間) から一様サンプリングを行いたい。このとき、超球の一様サンプルをきちんと構成するのが面倒くさそう¹³² だと考えて、代わりに「 $[-1, 1]^n$ の超立方体からランダムサンプリングを行い、超球の外の方が点が出た場合は捨てる」という形でサンプリングをしたとする。このサンプリングは現実的な数値実験としてうまく行くだろうか。

2次元や3次元ならば、正方形や立方体の中にランダムに点を打ったら少なくない確率で円や球の中に点が打たれる (図 19)。しかし半径1の n 次元超球の体積は、ガンマ関数を用いて

$$B_n = \frac{\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2 + 1)} \quad (10.1)$$

と書けるので、スターリングの公式 (式 (13.35)) を用いると、一辺2の超立方体の体積との比率は

$$\frac{B_n}{2^n} \simeq \frac{1}{\sqrt{n\pi}} \left(\frac{\pi e}{2n}\right)^{n/2} \quad (10.2)$$

であり、これは n が大きいと指数的にゼロに向かう。つまり、超立方体中にランダムに点を打つと、極めて高い確率で超球の外に点が打たれてしまい、超球のサンプリングにならない。

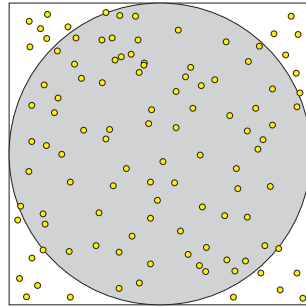


図 19: 2次元の場合に、 $[-1, 1]^2$ の正方形内にランダムに点を打ち、半径1の円内に入るか否かを見た様子。低次元の場合には大半の点が円内に入るが、高次元だとはならない。

ちなみに、高次元球を一様サンプリングすると、ほとんどの点は球面のすぐそばになる。この事実は、 n 次元空間中の半径 R の超球と、半径 $(1-a)R$ ($a > 0$) の超球の体積の比は

$$\frac{(1-a)^n R^n}{R^n} = e^{n \ln(1-a)} \quad (10.3)$$

なので、 $\ln(1-a) < 0$ であることを思い出せば、この量は n が大きくなると指数的に素早くゼロに収束することが分かる。つまり、半径 R の超球のほとんどの点は、半径 $(1-a)R$ よりも外側にある、つまり極めて超球の表面の近くにあるということである。

¹³¹ この章の内容は、J. マトウシエク『離散幾何学講義』丸善出版 12-14 章に基づく。

¹³² 極座標を用いれば一様サンプルは出来るが、ヤコビアンをきちんと考える必要がある。

例 2: 球体の包囲: $[-2, 2]^n$ の超立方体を考え、この中に各座標が ± 1 である 2^n 個の格子点が中心となるように半径 1 の超球を 2^n 個置く。そして原点を中心とする超球として、 2^n 個の頂点に置かれた超球にちょうど内側から接するようなもの考える (図 20)。

この超球は、超立方体の中に入っている小さな超球に思えるかもしれない。しかし、この超球の半径を計算すると $\sqrt{n} - 1$ なので、実は 10 次元の時点ですでに超立方体を突き破って外に飛び出している。超球の半径は次元を上げればいくらかでも大きくなる。

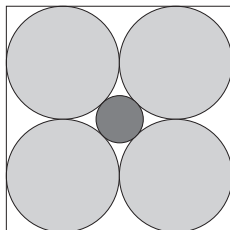


図 20: $[-2, 2]^2$ の正方形の中に、 $(1, 1), (-1, 1), (1, -1), (-1, -1)$ の 4 点を中心とする半径 1 の円 (薄い灰色) を置き、その円に内側から接するように原点を中心とした円 (濃い灰色) を置く。2 次元の場合には濃い灰色の円は非常に小さいが、10 次元だと濃い灰色の円 (超球) は外側の正方形 (超立方体) を突き破る。

[10-1]. n 次元空間中に、各ベクトル成分が平均 0、分散 1 のガウス分布に従う点 \mathbf{x} を多数ランダムサンプリングしてプロットする。このプロットはどのようなものになるか。

10.2 測度集中

特に反直観的であろう現象として、高次元球面における「測度集中 (measure concentration)」を取り上げよう。その最も興味深い結果の一つは、「高次元の超球面上の関数は、ほとんどの場所でほぼ定数関数になる」というレヴィの補題である。一見すると極めておかしな結果に思えるだろうが、これは証明可能な定理である。

定義 10.1 (C -リプシッツ). ある関数 $f(\mathbf{x})$ が C -リプシッツ (C -Lipschitz) であるとは、任意の元 \mathbf{x}, \mathbf{y} について

$$|f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y})| \leq C|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \quad (10.4)$$

が成り立つことをいう。

大雑把にいうと、どの場所で見ても傾きが C を超えることがないということである。リプシッツ性は関数が急激に変化しないことを要請したいときによく用いられる¹³³。

以下、 n 次元超球の表面 ($n-1$ 次元球面¹³⁴) を S^{n-1} と書く。また、超球面上の集合 A が超球面に占める割合を $P[A] = |A|/|S^{n-1}|$ と書く。

定理 10.1 (レヴィの補題 (Levy's lemma)). f を $n-1$ 次元超球面 S^{n-1} から実数 \mathbb{R} への a -リプシッツな関数とする。超球面上の f の中央値¹³⁵ (median) を $\text{med}[f]$ とする。このとき、任意の $t > 0$ について、以下が成り立つ。

$$P[|f(\mathbf{x}) - \text{med}[f]| > t] \leq 4e^{-t^2 n/2a^2} \quad (10.5)$$

¹³³ 例えば微分方程式の解の存在と一意性を示す際に、リプシッツ連続であることが仮定に置かれる (ピカールの逐次近似法)。

¹³⁴ 「 n 次元球面」という場合、その球面が存在する空間次元ではなく、球面自身の次元でいう (空間次元より 1 低い次元になる) 点に注意。例えば我々のいる 3 次元空間中の球の表面は「2 次元球面」である。

¹³⁵ $\int d\mathbf{x} \chi[f(\mathbf{x}) \leq f^*] / \int d\mathbf{x} = \frac{1}{2}$ となる f^* を「中央値」と呼び、 $\text{med}[f]$ と書く。

すなわち、超球面上のほとんどすべての点で、 f は中央値に非常に近い値をとっているということである。これが「ほとんど定数関数」の意味である。最終的な結果は前章の集中不等式（ほとんど確実に特定の値をとる）に近く、実際集中不等式を「～の性質を満たす任意の分布はほとんど特定の値をとる」のように言い換えれば、これは測度集中そのものである。ただし課されている条件が少し異なる（分散などの制限か、リプシッツ性か）ので、ここでは別の章で扱っている。

レヴィの補題の証明の鍵となるのは、球面における測度集中である。

定理 10.2 (球面の速度集中 (measure concentration for the sphere)). A を S^{n-1} の部分集合で、超球面の面積の半分以上を占めるもの ($P[A] \geq \frac{1}{2}$) とする。また、 A からの距離が $\varepsilon (> 0)$ 以下である領域を A_ε とする。このとき、以下が成り立つ。

$$1 - P[A_\varepsilon] \leq 2e^{-\varepsilon^2 n/2} \quad (10.6)$$

$\varepsilon > 0$ は十分小さくとることができるが、その場合でも次元 n を大きくすれば右辺は指数的に 0 に収束する。つまり、面積を半分にする領域 A から距離 ε だけ膨らませると、超球面はほぼすべて覆ってしまうということである。あるいは、面積が半分の場合の A を考え、その境界を ∂A とすると、境界線 ∂A からの距離が ε 以内の領域が超球面のほぼ全てであるということである。

係数を少し弱めた場合の一般的な証明は補論に譲り、ここでは簡単な場合として、 A がちょうど半球、 ∂A が赤道である場合になぜこの結果が成り立つのかを説明する。面積を固定した場合に境界の長さを最小化する図形は円（超球）なので、 A を半球（境界 ∂A は $n-1$ 次元超球）とすれば ∂A からの距離が ε 以内の領域は小さくなると考えられる。なので A を半球にする設定は、 A からの距離が ε 以上の領域 A_ε^c の面積が大きくなるような状況設定としてもっともらしい¹³⁶。

A が半球の場合の状況を横から見ると図 21 左のようになる（茶色の領域が A ）。 A_ε ではない領域 A_ε^c は、図 21 の薄いグレーの領域である。ここで、 A_ε^c の面積は、図 21 右のように考えることにより、半径 $1 - \varepsilon^2/2$ の超半球面（濃いグレー）で上から押さえられる¹³⁷。よって、 ε が小さければ

$$1 - P[A_\varepsilon] = \frac{|A_\varepsilon^c|}{|S^{n-1}|} \leq \frac{1}{2}(1 - \varepsilon^2/2)^{n-1} \leq \frac{1}{2}e^{-(n-1)\varepsilon^2/2} \quad (10.7)$$

と押さえられる。これは細かい係数を除けば求めたかった式と同じ形をしている。

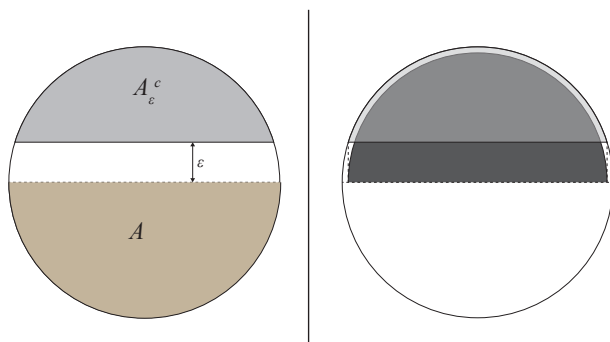


図 21: 領域 A (左図茶色) が半球の場合の領域 A_ε^c (左図薄いグレー) および、半径 $1 - \varepsilon^2/2$ の超半球面 (右図濃いグレー)。同じ場所の傾きは濃いグレーの方が大きいため、面積も濃いグレーの方が大きい。

[10-2]. A を S^{n-1} の部分集合で、超球面の面積の半分以下を占めるもの ($0 < P[A] \leq \frac{1}{2}$) とする。 $d > 0$ として、 $2e^{-d^2 n/2} < P[A]$ を満たすものを選ぶ。このとき、 $\varepsilon \geq d$ において以下の関係が成り立つことを示せ。

$$1 - P[A_\varepsilon] \leq 2e^{-(\varepsilon-d)^2 n/2} \quad (10.8)$$

¹³⁶ これは「等周不等式 (isoperimetric inequality)」と呼ばれるものであり、証明することもできる。

¹³⁷ z 軸と直交する面を、便宜的に xy 面と呼ぶ。 A_ε^c と半径 $1 - \varepsilon^2/2$ の超半球面とで、同じ xy 座標の点の傾きを比較すると、どの点においても半径 $1 - \varepsilon^2/2$ の超半球面の方が傾きが大きい。曲面の面積の公式を思い出せば、これは半径 $1 - \varepsilon^2/2$ の超半球面の方が面積が大きいことを意味している。

球面の測度集中を用いれば、レヴィの補題も簡単に示せる。

定理 10.1 の証明. 領域 A として $A := \{\mathbf{x} | f(\mathbf{x}) \leq \text{med}[f]\}$ をとる。median の定義より、 A の面積は超球面全体の面積のちょうど半分である。 f は a -リプシッツなので、領域 A_ε における f の値は $\text{med}[f] + a\varepsilon$ 以下である。よって、 $a\varepsilon = t$ と置くと

$$P[f(\mathbf{x}) > \text{med}[f] + t] \leq 1 - P[A_{t/a}] \leq 2e^{-t^2 n / 2a^2} \quad (10.9)$$

が得られる。

同様にして

$$P[f(\mathbf{x}) < \text{med}[f] - t] \leq 2e^{-t^2 n / 2a^2} \quad (10.10)$$

も得られる。両者を足すことで欲しかったレヴィの補題を得る。□

レヴィの補題は、平衡統計力学における「典型性」を示すのに用いられる¹³⁸。マクロな系においては、とりうる状態（例えばあるエネルギーシェル内の状態）のほとんどすべてが、マクロには（マクロな物理量を見ている範囲では）区別できないことを証明出来る。これが典型性と呼ばれる性質である。

マクロ系の量子状態を一様にサンプルする際には、超球が自然に表れる。 n 次元ヒルベルト空間の量子純粋状態は、その正規直交基底を $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^n$ として

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^n c_j |e_j\rangle \quad (10.11)$$

と書ける。ただし $c_j = a_j + ib_j$ は複素数で、規格化条件 $\sum_j |c_j|^2 = \sum_j |a_j|^2 + |b_j|^2 = 1$ を満たす。よって n 次元ヒルベルト空間中の量子純粋状態は、 $2n$ 次元の実空間中の $2n - 1$ 次元超球面 S^{2n-1} に対応付けられる。以下「量子純粋状態をランダムに選んだ」と述べた場合、この超球面上から均一に¹³⁹ サンプルする状況を考えることにする。

定理 10.3 (量子純粋状態の典型性 (typicality)). 正規直交基底 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^n$ を持つ n 次元ヒルベルト空間 \mathcal{H} を考える。この空間中の量子状態における物理量 O のミクロカノニカル平均を $\langle O \rangle := \frac{1}{n} \sum_j \langle e_j | O | e_j \rangle$ で定義する¹⁴⁰。ランダムに選ばれた量子純粋状態が、ミクロカノニカル平均の値から ε 以上ずれる確率は

$$P[|\langle \psi | O | \psi \rangle - \langle O \rangle| > \varepsilon] \leq 4e^{-n\varepsilon^2 / 4\|O\|^2} \quad (10.12)$$

と上から押さえられる。ただし $\|O\|$ は演算子ノルム（定義 5.3）である。

証明. O の $|\psi\rangle$ での期待値を、 $f(|\psi\rangle) := \langle \psi | O | \psi \rangle$ とベクトルから実数への関数として表す。しばらく $|\psi\rangle$

¹³⁸以下で述べるレヴィの補題を用いた結果は、Sandu Popescu, Anthony J. Short, and Andreas Winter, *Entanglement and the foundations of statistical mechanics*. Nature Physics volume 2, pages 754–758 (2006) に基づく。平衡統計力学を典型性で特徴づける議論は古くからあり、例えばボルツマンの論文 (L. Boltzmann, *Ueber die mechanischen Analogien des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik*. Journal für die reine und angewandte Mathematik **100**, 201 (1887)) や古い教科書 (R. C. Tolman, *The principles of statistical mechanics*. Oxford Clarendon Press (1938), A. I. Khinchin, *Mathematical foundations of statistical mechanics*. Dover (1949)) にも見られる。統計力学の基礎付けを巡る議論の歴史は、稲葉肇『統計力学の形成』名古屋大学出版会に詳しい。

¹³⁹より正確には、超球面上の「ハール測度 (Haar measure)」、すなわち任意の球面の回転操作に対して不変になるような測度でサンプルすることにする。

¹⁴⁰混合状態を用いて書けば、これはミクロカノニカル状態 $\rho^{\text{MC}} := \frac{1}{n} \sum_j |e_j\rangle \langle e_j|$ に対する O 期待値 $\text{Tr}[O\rho^{\text{MC}}]$ のことである。

を n 次元複素ベクトルと見て議論を進める。すると任意の $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ について

$$\begin{aligned}
|f(|\psi\rangle) - f(|\phi\rangle)| &= |\langle\psi|O|\psi\rangle - \langle\phi|O|\phi\rangle| \\
&= \frac{1}{2} |(\langle\psi| - \langle\phi|)O(|\psi\rangle + |\phi\rangle) + (\langle\psi| + \langle\phi|)O(|\psi\rangle - |\phi\rangle)| \\
&\leq \frac{1}{2} \{ |(\langle\psi| - \langle\phi|)O(|\psi\rangle + |\phi\rangle)| + |(\langle\psi| + \langle\phi|)O(|\psi\rangle - |\phi\rangle)| \} \\
&\leq \|O\| (|\psi\rangle - |\phi\rangle) (|\psi\rangle + |\phi\rangle) \\
&\leq 2\|O\| (|\psi\rangle - |\phi\rangle)
\end{aligned} \tag{10.13}$$

という不等式が得られる。ただし 4 行目では演算子ノルムの性質 $|\mathbf{u}^\top A \mathbf{v}| \leq \|A\| \|\mathbf{u}\| \|\mathbf{v}\|$ を用いた。また 5 行目では三角不等式 $|\langle\psi| + \langle\phi|| \leq \|\psi\rangle + \|\phi\rangle| = 2$ を用いた。

$|\langle\psi| - \langle\phi||$ は、 $|\psi\rangle$ を $2n$ 次元実ベクトルとして見てもベクトルノルムの大きさは変わらない。そのため上の不等式は、2次元実ベクトルを引数に持つ関数 f が $2\|O\|$ -リプシッツであることを意味している。よってレヴィの補題を適用することで、求めたい不等式を得る。□

10.3 <補論>：係数を弱めた超球面の測度集中の証明

ここでは、指数の係数を $\frac{1}{2}$ から $\frac{1}{4}$ に弱めた不等式

$$1 - P[A_\varepsilon] \leq 2e^{-\varepsilon^2 n/4} \tag{10.14}$$

を証明する。

この証明では、体積についての算術幾何平均不等式を用いる。Vol(X) で X の体積とする。二つの集合 X, Y の平均を $\frac{X+Y}{2} := \{\mathbf{x} = \frac{\mathbf{y}+\mathbf{z}}{2} | \mathbf{y} \in X, \mathbf{z} \in Y\}$ で定義すると

$$\text{Vol}\left(\frac{X+Y}{2}\right) \geq \sqrt{\text{Vol}(X)\text{Vol}(Y)} \tag{10.15}$$

が成り立つことが示せる。以下ではこれは事実として認める¹⁴¹。

超球面上の領域 A と原点の内分で書ける点の集合 $C(A) := \{\mathbf{x} = k\mathbf{y} | \mathbf{y} \in A, 0 \leq k \leq 1\}$ を導入する。 A の ε 近傍 A_ε の補集合を $A_\varepsilon^c := S^{n-1} \setminus A_\varepsilon$ と書く。このとき、任意の $\mathbf{x} \in C(A)$ 、 $\mathbf{y} \in C(A_\varepsilon^c)$ に対し、

$$\left| \frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{2} \right| \leq 1 - \frac{\varepsilon^2}{8} \tag{10.16}$$

が成り立つ¹⁴² (図 22)。これにより $\frac{C(A)+C(A_\varepsilon^c)}{2}$ は半径 $1 - \frac{\varepsilon^2}{8}$ の超球 (図 22 茶色領域) に含まれることが分かる。

$\mu(X)$ で、集合 X が半径 1 の超球に占める体積の割合 $\mu(X) := \text{Vol}(X)/\text{Vol}(B^n)$ を表すことにする。すると $P(A) = \mu(C(A))$ が成り立つので、式 (10.15) を用いると

$$\left(1 - \frac{\varepsilon^2}{8}\right)^n \geq \mu\left(\frac{C(A)+C(A_\varepsilon^c)}{2}\right) \geq \sqrt{\mu(C(A))\mu(C(A_\varepsilon^c))} = \sqrt{P[A]P[A_\varepsilon^c]} \geq \sqrt{\frac{1}{2} \cdot P[A_\varepsilon^c]} \tag{10.17}$$

となるので、

$$1 - P[A_\varepsilon] = P[A_\varepsilon^c] \leq 2 \left(1 - \frac{\varepsilon^2}{8}\right)^{2n} \leq 2e^{-\varepsilon^2 n/4} \tag{10.18}$$

を得る。

¹⁴¹これを一般化したブルン・ミンコフスキーの定理の証明は、J. マトウシエク『離散幾何学講義』丸善出版の第 12 章に出ている。大雑把な証明のアイデアは、まず二つが直交座標系に沿った直方体 (各辺が x_1, \dots, x_n 及び y_1, \dots, y_n) の場合には、示すべき不等式は $\prod_{i=1}^n ((x_i + y_i)/2) \geq \prod_{i=1}^n \sqrt{x_i y_i}$ となり、これは通常の相加相乗平均不等式そのものである。あとは直方体同士をくっつけてもやはり不等式が成り立つことを帰納的に示していけばよい。

¹⁴² \mathbf{x}, \mathbf{y} がそれぞれ A, A_ε^c 上にある場合を調べれば十分であり、その場合は両点はともに原点からの距離が 1 かつ両点間の距離が ε 以上ということから、この不等式は容易に示せる。

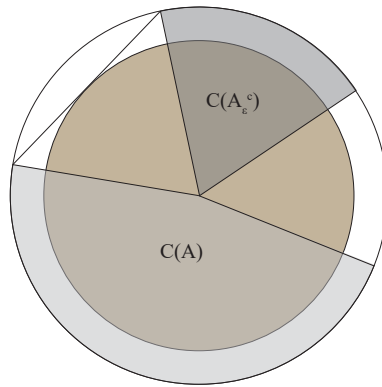


図 22: $C(A)$ と $C(A_\varepsilon^c)$ の内分点で書ける領域は、半径 $1 - \frac{\varepsilon^2}{8}$ の超球（茶色）に含まれる。

11 マルコフ過程

11.1 マルコフ過程の定義

「状態が時間とともにどのように変化するか」が、確率的に決まるようなプロセスを「確率過程 (stochastic process)」という¹⁴³。特に確率過程が「次の状態の発生確率が、今の状態が何であるかにも依存しており、それより過去の状態には依存しない」という性質を持つとき、この性質を「マルコフ性 (Markov property)」という。時間が離散的で、マルコフ的な確率過程を「マルコフ連鎖 (Markov chain)」という。

マルコフ過程においては、例えばとりうる状態が A~C の三状態で、今の状態が A のときに「次のステップでも A に留まる確率が 1/2」「A から B に変わる確率が 1/3」「A から C に変わる確率が 1/6」のように定められている。物理的な対象の例としては、複数の安定な状態をとる生体内のたんぱく質（この場合、確率的な状態変化は熱ゆらぎによって生じる）がある。抽象的な例だと、ランダムウォークはこの例に当たる。

マルコフ性から、一つ先のステップの確率分布は、今の確率分布だけで定まる。 n ステップ目における状態 i の確率分布を p_i^n と書くことにすると、A,B,C の三状態系ならば、次のステップの確率分布は

$$\begin{pmatrix} p_A^{n+1} \\ p_B^{n+1} \\ p_C^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{AA} & R_{AB} & R_{AC} \\ R_{BA} & R_{BB} & R_{BC} \\ R_{CA} & R_{CB} & R_{CC} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_A^n \\ p_B^n \\ p_C^n \end{pmatrix} \quad (11.1)$$

という形で、書くことが出来る。ここで、行列 R は 7.2 節 (定義 7.3) で導入した確率行列であり、それぞれの状態変化の確率を定めたものである。例えば R_{BA} ならば、「今の状態が A の場合に、次のステップで状態が B になる確率」を表している。ひとつ前の段落で書いた具体例ならば、 $R_{BA} = 1/3$ である。

R は確率行列でないといけないのは、以下の理由による。確率の和は 1 にならないといけないので

$$\sum_i p_i^n = 1 \quad (11.2)$$

は任意のステップ数 n で満たされないといけない。これを成り立たせるためには、行列 R もまた

$$\sum_i R_{ij} = 1 \quad (11.3)$$

が任意の j で満たされないといけない。これは「もし今状態 j にいるとして『次のステップでどの状態に動くか』の確率を、すべての行き先の状態について足したら 1 になる」という事実を表している。そしてもちろん遷移確率は非負でないといけないので $R_{ij} \geq 0$ が成り立つ。よって R は確率行列である。

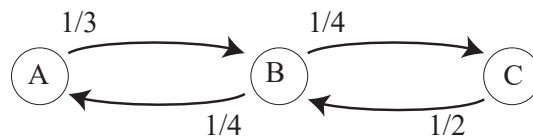


図 23: 考えている三状態系の遷移確率。

確率過程の例として、図 23 のような三状態の確率過程を考えてみよう。矢印の根元に書かれている数字が、その遷移が起きる確率である。この確率過程の時間発展方程式は

$$\begin{pmatrix} p_A^{n+1} \\ p_B^{n+1} \\ p_C^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2/3 & 1/4 & 0 \\ 1/3 & 1/2 & 1/2 \\ 0 & 1/4 & 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_A^n \\ p_B^n \\ p_C^n \end{pmatrix} \quad (11.4)$$

¹⁴³ 高度な数学的知識が不要で読める確率過程の教科書としては、R. デュレット『確率過程の基礎』丸善出版、などがある。ウェブで読めるテキストとしては逆瀬川浩孝「確率過程とその応用」(<http://www.f.waseda.jp/sakas/stochastics/stochastics.pdf>)などがある。

である。 $R_{AC} = R_{CA} = 0$ は、この確率過程では A から C に 1 ステップで変化することは出来ず、必ず B を経由しないと A から C へは移り変わらないという事実を表している (図 23 参照)。

11.2 定常分布と収束定理

確率過程では、一般に 1 ステップ進むことによって確率分布は変化する。しかし、ある特別な確率分布は、1 ステップ進んでも分布が元のままである。このような分布を「定常分布」という。

定義 11.1 (定常分布 (stationary distribution)). 確率行列 R で記述される確率過程における「定常分布」 \mathbf{p}^{ss} とは、以下を満たす確率分布である。

$$\mathbf{p}^{ss} = R\mathbf{p}^{ss} \quad (11.5)$$

我々は以下で、「自然な」確率行列 R においては、定常分布が一意的に存在し、さらにどのような確率分布から確率過程を初めても、十分時間が経つと必ず確率分布が定常分布に収束することを示す。確率行列に対して課す条件を述べるために、いくつかの性質を導入しよう。以下、すべての行列が非負実数である行列を「非負行列」と呼ぶ。確率行列はもちろん非負行列である。

定義 11.2 (連結性). $K \times K$ の非負行列 A について、任意の $i, j \leq K$ ($i \neq j$) に対し、自然数の列 a_1, a_2, \dots, a_n で、 $a_1 = i, a_n = j$ かつ任意の $1 \leq l \leq n-1$ において $R_{a_l+1 a_l} > 0$ を満たすようなものが存在するとき、この行列 R は「連結性¹⁴⁴」を満たすという。

連結性は、任意の二状態 j, k に対し、 j と k を結ぶ非ゼロの行列成分の経路が存在することを述べている。例えば

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (11.6)$$

は連結性を満たしている。一方

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 5 \\ 1 & 2 & 0 & 2 \\ 2 & 3 & 3 & 0 \end{pmatrix} \quad (11.7)$$

は、状態 2, 3, 4 はどれも状態 1 に行くことができないので、この行列 B は連結性を満たさない。また、

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix} \quad (11.8)$$

も連結性を満たさない。

¹⁴⁴ 「連結性」のことは「既約性 (irreducible)」とも呼ばれる。

定理 11.1. 確率行列 R が連結性を満たすとする。このとき、 R の定常分布がただ一つ存在し、定常分布のすべての成分は非ゼロである。

この定理は初等的に証明することも出来る¹⁴⁵ が、ここでは以下の強力な定理に訴えることで証明を省略する。 R のペロン根 λ_{PF} が最大固有値 1 であり¹⁴⁶、対応する固有ベクトルが定常分布である。

定理 11.2 (ペロン・フロベニウスの定理 (Perron-Frobenius theorem)). A は実行列で、連結性を満たし、非対角成分はすべて非負 ($i \neq j$ なら $A_{ij} \geq 0$) であるとする¹⁴⁷。このとき、「ペロン根 (Perron root)」と呼ばれる A の固有値 λ_{PF} が存在し、以下を満たす。

1. λ_{PF} は実数であり、対応する固有ベクトルはすべてのベクトル成分が正の実数にとれる。
2. λ_{PF} は縮退していない。
3. 他の任意の固有値 λ について、 $\text{Re}\lambda < \lambda_{PF}$ 。特に A の全成分が正のとき、 $|\lambda| < \lambda_{PF}$ 。
4. λ_{PF} 以外の固有値に対応する固有ベクトルで、すべてのベクトル成分が正の実数となるものは存在しない。

次に、確率分布が長時間後に定常分布に収束することを示そう。そのために「強い連結性」を導入する

定義 11.3 (強い連結性 (strong connectivity)¹⁴⁸)。非負行列 R が強い連結性を満たすとは、正整数 m が存在し R^m (R の m 乗) の行列要素が全て正となることをいう。

強い連結性を満たすならば連結性を満たすことは容易に確認できる。連結性を満たすが強い連結性を満たさない行列の例としては

$$R = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (11.12)$$

¹⁴⁵ R のサイズ K に対する帰納法で証明する。 $K = k$ で仮定が成り立つとする。連結性を満たす $(k+1) \times (k+1)$ の確率行列 R に対し、 R を用いて $k \times k$ の確率行列 R' を

$$R'_{i,j} := R_{i,j} + \frac{R_{i,k+1}R_{k+1,j}}{\sum_{l=1}^k R_{l,k+1}}. \quad (11.9)$$

と構成する。 R' が確率行列であり連結性を満たすことは容易に確認できる。

仮定により $k \times k$ 確率行列 R' は、 $R'\mathbf{p}' = \mathbf{p}'$ を満たすすべての成分が非ゼロの確率ベクトル \mathbf{p}' (定常分布) が存在する。まず存在を示す。この \mathbf{p}' を用いて、 \mathbf{p} を

$$p_i = \begin{cases} p'_i & : i \leq k, \\ \frac{1}{\sum_{l=1}^k R_{l,k+1}} \sum_{j=1}^k R_{k+1,j} p'_j & : i = k+1. \end{cases} \quad (11.10)$$

と定義すると、これは確かに R の全成分正の固有値 1 の (確率ベクトルとは限らない) 固有ベクトルであることが代入することで確認できる。

次に一意性を示す。定常分布が \mathbf{p}^a と \mathbf{p}^b の 2 つ存在したとする。 \mathbf{p}^a を $1 \leq i \leq k$ に制限したもの (つまり $(p_1^a, p_2^a, \dots, p_k^a)^t$ というベクトル) を $\mathbf{p}^{a'}$ と書くと、上記の R' は $\mathbf{p}^{a'}$ を定常分布に持つ。この事実は

$$\sum_{j=1}^k R'_{i,j} p_j^a = \sum_{j=1}^k R_{i,j} p_j^a + \sum_{j=1}^k \frac{R_{i,k+1} R_{k+1,j} p_j^a}{\sum_{l=1}^k R_{l,k+1}} = (p_i^a - R_{i,k+1} p_{k+1}^a) + \frac{R_{i,k+1} (p_{k+1}^a - R_{k+1,k+1} p_{k+1}^a)}{1 - R_{k+1,k+1}} = p_i^a \quad (11.11)$$

という計算から確認できる。同様に \mathbf{p}^b も R' の定常分布である。しかし R' は定常分布をただ一つしか持たないので、 $\mathbf{p}^{a'} = c\mathbf{p}^{b'}$ (c は定数) である。これにより $\mathbf{p}^a = c\mathbf{p}^b$ が示せる。

¹⁴⁶ 固有値 1 を持つことは、横ベクトル $(1, \dots, 1)$ が固有値 1 の左固有ベクトルであることから確認できる。別の実固有値 λ' が 1 を上回るとして矛盾を導く。以下では、 $|\mathbf{v}|$ で、ベクトル \mathbf{v} のノルムではなく、 $(|v_1|, \dots, |v_n|)^T$ という、各ベクトル成分の絶対値をとったベクトルを表すことにする。 λ' に対応する固有ベクトル \mathbf{v}' について、 $|\lambda'|^n |\mathbf{v}'| = |\lambda'^n \mathbf{v}'| = |A^n \mathbf{v}'| \leq A^n |\mathbf{v}'|$ となり、 $|\mathbf{v}'|$ を確率ベクトルになるようにとると、これは確率の規格化条件に矛盾。よって 1 を上回る固有値は存在しない。

¹⁴⁷ 対角成分は負でも構わない。

¹⁴⁸ この性質は「非周期性 (aperiodic)」などとも呼ばれる。

がある。この行列を確率行列とする確率過程は、状態 1 と 2 の間を分布が振動する挙動を示す。強い連結性は、このような「振動し続けて減衰しない」振る舞いを排除する。

定理 11.3 (収束定理 (Convergence theorem)). $K \times K$ の確率行列 R が強い連結性を満たすとする。このとき、任意の初期分布 \mathbf{p}^0 に対し、 n ステップ後の確率分布 $\mathbf{p}^n := R^n \mathbf{p}^0$ は無限ステップ後に定常分布 \mathbf{p}^{ss} に収束する。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{p}^n = \mathbf{p}^{ss}. \quad (11.13)$$

証明. 部分ベクトル空間 $V_0 \subseteq \mathbb{R}^K$ として $V_0 := \{\mathbf{v} \mid \sum_i v_i = 0\}$ を考える。もし $\mathbf{v} \in V_0$ ならば、 $\sum_i (R\mathbf{v})_i = \sum_{i,j} R_{ij} v_j = \sum_j v_j = 0$ より $R\mathbf{v} \in V_0$ が成り立つ。すなわち線形変換 R は V_0 を不変に保つ。

任意の初期分布 \mathbf{p}^0 は適当な $\mathbf{v}^0 \in V_0$ を用いて $\mathbf{p}^0 = \mathbf{p}^{ss} + \mathbf{v}^0$ と書くことが出来るので、収束定理を示すには任意の $\mathbf{v} \in V_0$ に対し、 R を無限回作用させると消えてしまう ($\lim_{n \rightarrow \infty} R^n \mathbf{v} = \mathbf{0}$) ことを示せばよい。強い連結性より、 R^m の全行列成分が正となるような m が存在する。 $\mu := \min_{i,j} (R^m)_{ij}$ を R^m の最小値としよう¹⁴⁹。全行列成分が μ である行列 M ($M_{ij} = \mu$) を用いて、行列 S を

$$S := R^m - M. \quad (11.14)$$

と定義する。構成により、行列 S の全成分は非負であり、また任意の j について $\sum_i S_{ij} = 1 - K\mu < 1$ が成り立つ。さらに、任意の V_0 の元 $\mathbf{v} \in V_0$ に対しては、 $M\mathbf{v} = \mathbf{0}$ より、 \mathbf{v} への S の作用と R^m の作用は同一である。

$$S\mathbf{v} = R^m \mathbf{v} \quad (11.15)$$

これらの事実により、任意の $\mathbf{v} \in V_0$ に対して R^m を作用させると、以下のように 1-ノルムが真に減少することが言える。

$$|R^m \mathbf{v}|_1 = |S\mathbf{v}|_1 \leq \sum_{i,j} S_{ij} |v_j| = (1 - K\mu) |\mathbf{v}|_1. \quad (11.16)$$

これにより、求めたかった結果

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |(R^m)^n \mathbf{v}^0|_1 \leq \lim_{n \rightarrow \infty} (1 - K\mu)^n |\mathbf{v}^0|_1 = 0, \quad (11.17)$$

を得る¹⁵⁰。 □

ペロン・フロベニウスの定理を仮定すると、収束定理は以下のように理解することも出来る。必要ならば R を R^m に置き換えることにより、 R のすべての行列成分が正として一般性を失わない。ペロン根 $\lambda_{PF} = \lambda_0 = 1$ に対応する固有ベクトルを \mathbf{x}_0 、その他の固有値と (一般化) 固有ベクトルを λ_i, \mathbf{x}_i とする。初期分布を $\mathbf{v}^0 = \sum_i c_i \mathbf{x}_i$ と展開すると、固有ベクトルだけで空間が張れているのならば

$$\mathbf{v}^n = R^n \mathbf{v}^0 = \sum_i c_i R^n \mathbf{x}_i = \sum_i c_i \lambda_i^n \mathbf{x}_i \quad (11.18)$$

となるが、 $|\lambda_i| < 1$ ($i \geq 1$) なので、 $i \geq 1$ においては $c_i \lambda_i^n \mathbf{x}_i$ は $n \rightarrow \infty$ 極限でゼロになる。よって定常分布 \mathbf{x}_0 だけが残る。一般化固有ベクトルの場合はもう少し煩雑だが同様の議論で示せる¹⁵¹。

[11-1]. 式 (11.4) で時間発展が与えられる確率過程を考える。初期分布を $p_A^0 = a$ 、 $p_B^0 = b$ 、 $p_C^0 = c$ とする。ただし $a + b + c = 1$ である。このとき、 n を無限に大きくした状況、つまり十分時間がたった後の状況における確率分布 $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{p}^n$ を求めよ。

¹⁴⁹ 確率行列の規格化条件により、 $\mu < 1/K$ が成り立つ。

¹⁵⁰ ノルムの独立性 (定義 5.1) より、ノルムがゼロとなるベクトルはゼロベクトル $\mathbf{0}$ のみである。

¹⁵¹ ジョルダンブロックは対角行列 $D = \lambda I$ とべき零行列 Z を用いて $D + Z$ と書ける。この N 乗は $(D + Z)^N$ だが、 Z は行列サイズ K 以上のべき乗でゼロになるので、結局ゼロでない寄与を持つ項においては、少なくとも $N - K$ 回は $D = \lambda I$ がかかっている。なので (Z, D の選び方の場合の数まで考慮すると) おおよそ $N^K \lambda^N$ 程度の大きさになり、 $|\lambda| < 1$ ならば $N \rightarrow \infty$ においてはこれはゼロに収束する。

11.3 有名なマルコフ過程の問題とその性質

ここではいくつか有名なマルコフ過程を紹介しよう。

ギャンブラーの破産問題：勝敗確率が半々のギャンブルがある。ギャンブルに勝つとコインを1枚獲得し、負けるとコインを1枚失う。ギャンブラーは今 m 枚のコインを持っている。このコインを $N (> m)$ 枚まで増やしたら、ギャンブラーは満足してギャンブルをやめる。逆にコインが0枚になったらギャンブラーは破産し、ギャンブルを続行できなくなる。自分のコインが N 枚または0枚になるまでギャンブラーはギャンブルを続ける。

ギャンブラーが破産する確率を求めよ。

重要な事実は「どのようなルール（今までのギャンブルの結果に依存してよい）でギャンブルを続ける、あるいはやめることを選択したとしても、コインの枚数の期待値は変化しない」という点である¹⁵²。よってコインの枚数の期待値は常に m 枚である。

今課されているルールは「破産するか N 枚に達した（勝利）ときに限りギャンブルをやめる」というものである。さて、無限ステップ後には必ずギャンブラーは破産するか勝利している。無限ステップ後の破産確率を p 、勝利確率を $1-p$ とする。無限ステップ後のコインの枚数の期待値は $p \cdot 0 + (1-p) \cdot N = (1-p)N$ である。これが m に等しい必要があるため、破産確率は $p = 1 - m/N$ である。

[11-2]. ギャンブルに勝つ確率を q 、負ける確率を $1-q$ とする。この場合の破産確率を求めよ。（ヒント：コイン m 枚における得点を a_m 点とし、得点の期待値が変化しないようにする）

ギャンブル終了までの平均時間：上記と同じ設定のギャンブルを考える。ギャンブラーは最初にコインを $m = 1$ 枚だけ持っているとする。

ギャンブラーが破産または勝利するまでに行うギャンブルの回数の期待値を求めよ。

最初にコイン m 枚持っている場合のギャンブル回数期待値を $T_{m,N}$ と書く。我々が知りたいのは $T_{1,N}$ である。これを求めるために、 N についての漸化式を導く。

我々が考えている問題は、 $0 \sim N$ 上のランダムウォークで、 0 と N が吸収状態（その状態になったら停止する）、始状態は 1 という問題だと理解できる。今の状態は 1 なので、次のステップで確率 $1/2$ で 0 、確率 $1/2$ で 2 に進む。ここで、両端の状態 0 と N を除いた、 $1 \sim N-1$ の領域上のランダムウォークに注目する（図 24）。 T の定義により、始状態 2 、 1 と $N-1$ を吸収状態とみなしたランダムウォークは、平均時間 $T_{1,N-2}$ を経て状態 1 または $N-1$ に初めて到達する。今の状態が 1 の場合も $N-1$ の場合も、以降停止する（ 0 または N に入る）までに必要な平均時間は $T_{1,N}$ である。よって

$$T_{1,N} = \frac{1}{2} \cdot 1 + \frac{1}{2} (1 + T_{1,N-2} + T_{1,N}) \quad (11.19)$$

という関係が成り立つ。これは

$$T_{1,N} = T_{1,N-2} + 2 \quad (11.20)$$

と等価である。 $T_1 = 0$ 、 $T_2 = 1$ であることは直接容易に確認できるので、この漸化式は

$$T_{1,N} = N - 1 \quad (11.21)$$

と解ける¹⁵³。

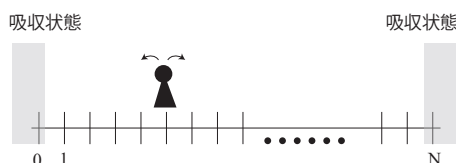


図 24: 両端の状態 0 と N が吸収状態であるような、 $1 \sim N-1$ の領域上のランダムウォーク

次の問題は組合せ論でよく見かけるものである。

¹⁵² 確率過程の用語を用いれば、マルチンゲールだということである。

¹⁵³ 一般の $T_{m,N}$ も解くことができ、答えだけ書くと $T_{m,N} = m(N-m)$ である。

お釣りが切れる問題：あるお店では500円の商品を販売している。あいにくお釣りの用意がない。今日、500円玉と1000円札を持った人が m 人ずつ、ランダムな順番で商品を買いに訪れる。どの時点でもお釣りが起きない確率（=任意の時点で「これまでに訪れた500円玉を持つ人の人数」 \geq 「これまでに訪れた1000円札を持つ人の人数」が成り立つ確率）を求めよ。

これは以下の場合の数を求める問題と実質的に同じである。

対角線を横切らない最短経路（カタラン数）：2次元格子を考える。 $(0,0)$ から (m,m) まで格子上を通過して到達する最短経路のうち、 $(1,0)$ を通り、 (n,n) の対角線を横切らない経路の場合の数を求めよ。

なお、この場合の数を「カタラン数（Catalan number）」といい、 C_m と書く¹⁵⁴。

お釣りの問題と格子上の最短経路とは、「500円玉を持った客の来訪＝一つ右のマスに進む」「1000円札を持った客の来訪＝一つ上のマスに進む」「対角線より左上に入る＝お釣りが切れる」という対応関係にある。なので、お釣りの問題はカタラン数を全最短経路数で割ったもの

$$P = \frac{C_m}{\binom{2m}{m}} \quad (11.22)$$

である¹⁵⁵。

ではカタラン数を求めよう。我々は、 (n,n) の対角線を左上に横切る経路（原点でいきなり上に進む場合も含む）の場合の数を求め、それを経路総数から引くことでカタラン数を求める。実は、対角線を左上に横切る経路は、最初に対角線を横切ったタイミングで、以降の経路を $y = x + 1$ の線に沿って折り返しを行う（図25）ことで、「 $(0,0)$ から $(m-1, m+1)$ への最短経路」と一対一対応を付けることが出来る。そのため、カタラン数は

$$C_m = \binom{2m}{m} - \binom{2m}{m-1} = \frac{1}{m+1} \binom{2m}{m} \quad (11.23)$$

と求まる。よって最初のお釣りの問題は $P = \frac{1}{m+1}$ と解ける。

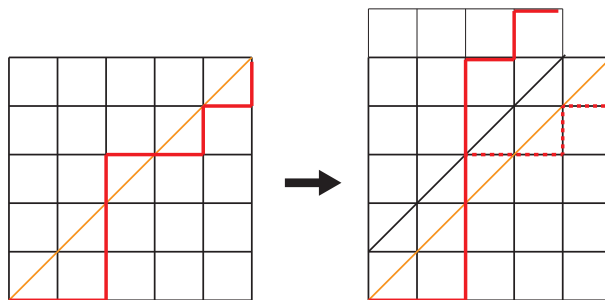


図 25: 対角線を横切って (m,m) に向かう最短経路と、 $(m-1, m+1)$ に向かう最短経路が一対一対応する。黒い斜めの線で折り返しを行っている。

[11-3]. 2次元格子を考える。 $(0,0)$ から (l,m) ($l > m$) まで格子上を通過して到達する最短経路のうち、 $(1,0)$ を通り、対角線 (n,n) を横切らない経路の場合の数を求めよ。

¹⁵⁴ ちなみに、カタラン数は漸化式 $C_{n+1} = \sum_{k=1}^n C_k C_{n-k}$ 、 $C_0 = 1$ の解として特徴づけるのが最も一般的である。ここから「 $n+1$ 人で行うトーナメント戦の総数（ただし人は区別しない）」「凸な $n+2$ 角形に対角線を $n-1$ 本引いて三角形 n 個に分割する方法の数」などはすべてカタラン数 C_n であることが導ける。

¹⁵⁵ ここで $\binom{a}{b}$ は $aC_b = a!/b!(a-b)!$ と同じで、 a 個から b 個を選ぶ組合せを表す。 C を用いる方法は日本ではよく用いられるが、海外ではあまり用いられない。

クーポンコレクター問題：ある商品には、 N 種類のクーポンのうちの一つが、等確率 $1/N$ で入っている。全種類のクーポンを集めると景品がもらえる。景品をもらうためには商品を平均で何個購入する必要があるか。

商品 t 個購入時点で保有しているクーポンの種類を与える確率変数を X_t とする。 $X_t = m$ のとき、確率 $(N - m)/N$ で $X_{t+1} = X_t + 1$ となり、確率 m/N で $X_{t+1} = X_t$ となる。このことは、 $X = m$ から $X = m + 1$ に進むまでに必要となる購入商品数の期待値が $N/(N - m)$ であることを意味している。我々は $X = 0$ から $X = N$ まで進む必要があるので、それに必要な購入商品数は

$$\sum_{m=0}^{N-1} \frac{N}{N-m} = N \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} \quad (11.24)$$

である。特に $\sum_{n=1}^N \frac{1}{n} \sim \ln N$ と振る舞うので、上記の結果は、 N 種類のクーポンをすべて集めるには $N \ln N$ 個程度の商品を購入する必要があることを意味している。

ちなみに、クーポンがすべて集まるまでに購入した商品数を m とすると、

$$P[m > [N \ln N + cN]] \leq e^{-c} \quad (11.25)$$

が成り立つ。この不等式は、「 m ステップ目にまだどれかクーポンが欠けている確率」は「 m ステップ目にクーポン i が欠けている確率」 $\times N$ で上から押さえられることを用いて

$$P[m > [N \ln N + cN]] \leq N \cdot \left(1 - \frac{1}{N}\right)^{[N \ln N + cN]} \leq N \cdot e^{-\frac{1}{N} \cdot (N \ln N + cN)} = e^{-c} \quad (11.26)$$

と導出できる。

11.4 <補論>：ペロン・フロベニウスの理論

ここではペロン・フロベニウスの定理の証明を与えよう。行列についての定理だが、この定理はこれまで見たような（エルミートや対角化可能などの）条件ではなく「行列成分の非負性」という一風変わった条件の下で成り立つ定理である。証明の仕方もこれまでの定理とはずいぶん異なる手法を用いる¹⁵⁶。

まず定理を再掲する。

定理 11.2 (ペロン・フロベニウスの定理 (Perron-Frobenius theorem)). A は実行列で、連結性を満たし、非対角成分はすべて非負 ($i \neq j$ なら $A_{ij} \geq 0$) であるとする¹⁵⁷。このとき、「ペロン根 (Perron root)」と呼ばれる A の固有値 λ_{PF} が存在し、以下を満たす。

1. λ_{PF} は実数であり、対応する固有ベクトルはすべてのベクトル成分が正の実数にとれる。
2. λ_{PF} は縮退していない。
3. 他の任意の固有値 λ について、 $\operatorname{Re} \lambda < \lambda_{PF}$ 。特に A の全成分が正のとき、 $|\lambda| < \lambda_{PF}$ 。
4. λ_{PF} 以外の固有値に対応する固有ベクトルで、すべてのベクトル成分が正の実数となるものは存在しない。

証明する際に重要となる性質は、連結性を満たし非対角成分がすべて非負な実行列 A について、適切な $c > 0$ と n を用いて定義される行列

$$\tilde{A} := (I + cA)^n \quad (11.27)$$

¹⁵⁶ ここでの証明は、ラックス『線形代数』、田崎晴明『数学 物理を学び楽しむために』(オンライン公開)などに基づく。山本哲郎『行列解析の基礎』には、ここで示したのとは異なる方針の証明が出ている。

¹⁵⁷ 対角成分は負でも構わない。

は、すべての行列成分が正とできるということである。また A と \tilde{A} は同じ固有ベクトルを持ち、対応する固有値は λ と $(1+c\lambda)^n$ の関係で結ばれる。この対応関係により、「正行列（すべての行列成分が正の行列）」というより取り扱いやすい行列を解析することで、非対角成分が非負の行列 A の性質が導ける。

命題 1 の証明. 集合 $S(A)$ を

$$A\mathbf{x} \geq m\mathbf{x} \quad (11.28)$$

を満たす非負ベクトル $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$ が存在するような m の集合とする。 $S(A)$ の最大値を M_A とする¹⁵⁸。我々は、 M_A が求めたい実固有値 λ_{PF} であることを示す。 M_A が実固有値ならそれがペロン根 $\tilde{\lambda}_{\text{PF}}$ であることは明らかなので、以下では M_A が固有値であることを示す。

以下 $M_{\tilde{A}}$ が \tilde{A} の実固有値であることを背理法で示す。 $M_{\tilde{A}}$ が \tilde{A} の固有値でないとする、非負ベクトル $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$ で

$$\tilde{A}\mathbf{x} \geq M_{\tilde{A}}\mathbf{x} \quad (11.29)$$

であり、少なくとも一つのベクトル成分 i で

$$(\tilde{A}\mathbf{x})_i > M_{\tilde{A}}x_i \quad (11.30)$$

が成り立つものが存在する。しかしそうすると、 $\varepsilon > 0$ を用いた $\mathbf{x}' := \mathbf{x} + \varepsilon\mathbf{e}_i$ (\mathbf{e}_i は i 方向の単位ベクトル) というベクトルを考えると、 i 以外の成分 $j (\neq i)$ について

$$(\tilde{A}\mathbf{x}')_j > (\tilde{A}\mathbf{x})_j \geq M_{\tilde{A}}x_j = M_{\tilde{A}}x'_j \quad (11.31)$$

が成り立ち、また i 成分についても ε を十分小さくとれば

$$(\tilde{A}\mathbf{x}')_i = (\tilde{A}\mathbf{x})_i + \varepsilon(\tilde{A}\mathbf{e}_i)_i > M_{\tilde{A}}(x_i + \varepsilon) = M_{\tilde{A}}x'_i \quad (11.32)$$

が成り立つように出来る¹⁵⁹。よって、すべてのベクトル成分について $\tilde{A}\mathbf{x}'$ の方が $M_{\tilde{A}}\mathbf{x}'$ よりも大きいので、 $M_{\tilde{A}}$ をそれよりもわずかに大きい $M'_{\tilde{A}} > M_{\tilde{A}}$ に置き換えても

$$\tilde{A}\mathbf{x}' \geq M'_{\tilde{A}}\mathbf{x}' \quad (11.33)$$

が成り立つ。しかしこれは $M'_{\tilde{A}} \in S(\tilde{A})$ を意味し、 $M_{\tilde{A}}$ が $S(\tilde{A})$ の最大値であることに矛盾。よって仮定が誤りで、ある $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$ の下で

$$\tilde{A}\mathbf{x} = M_{\tilde{A}}\mathbf{x} \quad (11.34)$$

が成り立つ。つまり $\tilde{\lambda}_{\text{PF}} = M_{\tilde{A}}$ は \tilde{A} の実固有値である。

$M_{\tilde{A}}$ の固有ベクトル \mathbf{x} のすべての成分が正（ゼロ成分を持たない）ことは、式 (11.34) 右辺のすべてのベクトル成分が正であることから直ちに従う。

最後に \tilde{A} の性質を A の性質と結び付けよう。

M_A の定義より $A\mathbf{x}^A \geq M_A\mathbf{x}^A$ となる \mathbf{x}^A が存在するが、これを用いて $\tilde{A}\mathbf{x}^A = (I + cA)^n\mathbf{x}^A \geq (1 + cM_A)^n\mathbf{x}^A$ が導ける。よって $(1 + cM_A)^n \leq M_{\tilde{A}}$ である。

一方、連続区間の実数 c に対し \mathbf{x} は $\tilde{A} = (I + cA)^n$ の固有ベクトルなので、 \mathbf{x} は A の固有ベクトルでもある¹⁶⁰。特に A における固有値は $\frac{1}{c}\sqrt[n]{M_{\tilde{A}}} - 1$ であり、 $A\mathbf{x} \geq (\frac{1}{c}\sqrt[n]{M_{\tilde{A}}} - 1)\mathbf{x}$ を満たす。よって $M_A \geq \frac{1}{c}\sqrt[n]{M_{\tilde{A}}} - 1$ 、すなわち $(1 + cM_A)^n \geq M_{\tilde{A}}$ である。

以上より、 $(1 + cM_A)^n = M_{\tilde{A}}$ が言え、 A も共通の全成分が正の固有ベクトル \mathbf{x} を持つ。よって命題 1 が示された。 \square

¹⁵⁸ 本当は最大値が存在するかは自明でないので、きちんと示す必要がある。最大値が存在することは以下のように示せる。

ノルムが 1 に規格化された n 次元球の球面 B を考える。 B はコンパクトである。 A の固有ベクトルたちは、適当にノルムを調整することで B の元に取りれる。各 $\mathbf{v} \in B$ について、 $c(\mathbf{v}) := \arg \max_a [A\mathbf{v} \geq a\mathbf{v}]$ を定義する。 $v(\mathbf{v})$ は B 上連続関数である。コンパクト空間上の連続関数は最大値を持つ。これは M_A である。

¹⁵⁹ $(\tilde{A}\mathbf{e}_i)_i \geq M_{\tilde{A}}$ のときは任意の ε が条件を満たすので、 $(\tilde{A}\mathbf{e}_i)_i < M_{\tilde{A}}$ の場合を考えれば十分である。このときは、 $\varepsilon < ((\tilde{A}\mathbf{x})_i - M_{\tilde{A}}x_i) / (M_{\tilde{A}} - (\tilde{A}\mathbf{e}_i)_i)$ と置けばよい。

¹⁶⁰ 特定の c だけであれば、 A の固有ベクトルではないベクトルが $(I + cA)^n$ の固有ベクトルとなる可能性もあるが、連続的な c で固有ベクトルとなるのならば、それは A の固有ベクトルである。

命題 2 の証明. まず複数の固有ベクトルを持たないことを示し、その後一般化固有ベクトルも持たないことを示す。1 の証明の場合と同様に、正行列 \tilde{A} について示せば十分である。

主張に反し、線形独立な固有ベクトル \mathbf{x}, \mathbf{y} を固有値 $M_{\tilde{A}}$ が持つと仮定する。つまり $\tilde{A}\mathbf{x} = M_{\tilde{A}}\mathbf{x}$ 、 $\tilde{A}\mathbf{y} = M_{\tilde{A}}\mathbf{y}$ が成り立つとする。このとき、 $\mathbf{z} = \mathbf{x} + a\mathbf{y}$ もまた \tilde{A} の固有値 $M_{\tilde{A}}$ の固有ベクトルである。だが、適切に係数 a を選ぶと、 \mathbf{z} のいくつかのベクトル成分は 0、残りの有限個のベクトル成分は正にすることができる。しかしこれは、 $M_{\tilde{A}}$ の固有ベクトルで $\geq \mathbf{0}$ を満たすものはゼロ成分を持たないという、既に証明した 1 の事実に矛盾する。よって仮定が誤りであり、線形独立な固有ベクトルは存在しない。

次に一般化固有ベクトルを持たないことを示す（以下、2.3 節に記した一般化固有ベクトルの性質は前提とする）。 A が一般化固有ベクトルを持てば \tilde{A} も一般化固有ベクトルを持つので、 \tilde{A} が一般化固有ベクトルを持たないことを示せば十分である。

主張に反し、 \tilde{A} の固有値 $M_{\tilde{A}}$ は固有ベクトル \mathbf{x} とともに二階の一般化固有ベクトル \mathbf{y} を持つとする。 \mathbf{y} が二階の一般化固有ベクトルであるということは

$$\tilde{A}\mathbf{y} = M_{\tilde{A}}\mathbf{y} + t\mathbf{x} \quad (11.35)$$

が成り立つということである。必要ならば $-\mathbf{y}$ を \mathbf{y} と置き直すことにより、 $t > 0$ として一般性を失わない。さらに必要ならば $\mathbf{y} + k\mathbf{x}$ を \mathbf{y} と置き直す¹⁶¹ ことにより、 $\mathbf{y} > \mathbf{0}$ として一般性を失わない。しかし式 (11.35) は、 $t\mathbf{x} > \varepsilon\mathbf{y}$ を満たす $\varepsilon > 0$ （このような ε は必ず存在する）について、 $(M_{\tilde{A}} + \varepsilon) \in S(\tilde{A})$ であることを示しており、これは $M_{\tilde{A}}$ の最大性に矛盾する。よって仮定が誤りで、 \tilde{A} は一般化固有ベクトルを持たない。□

命題 3 の証明. まず正行列 \tilde{A} の場合を扱う。 \tilde{A} の $M_{\tilde{A}}$ 以外の固有値 λ と、対応する固有ベクトル \mathbf{v} を考える¹⁶²。固有値方程式 $\tilde{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ について、各成分の絶対値をとる。すると i 成分目の関係式として

$$|\lambda||v_i| = |\lambda v_i| = \left| \sum_j \tilde{A}_{ij} v_j \right| \leq \sum_j \tilde{A}_{ij} |v_j| \quad (11.36)$$

が得られる。よって $\mathbf{v}' := \begin{pmatrix} |v_1| \\ \vdots \\ |v_n| \end{pmatrix}$ と置くと、上式は $\tilde{A}\mathbf{v}' \geq |\lambda|\mathbf{v}'$ と書ける。これは $|\lambda| \in S(\tilde{A})$ を意味して

おり、よって $M_{\tilde{A}} \geq |\lambda|$ が得られる。この不等式の等号が成り立たないことを示そう。主張に反し $M_{\tilde{A}} = |\lambda|$ と仮定すると、 \mathbf{v}' は \tilde{A} の固有ベクトルとなる必要があるので、式 (11.36) の不等式が全て等号達成する必要がある。これが実現するのは、 v_i たちの偏角が全て同じ場合であるが、このとき \mathbf{v} は \mathbf{x} の $e^{i\theta}$ 倍であり、 $\lambda = M_{\tilde{A}}$ となる。これは λ は $M_{\tilde{A}}$ と異なる固有値を選んだという設定に反する。よって仮定が誤りであり、等号は成り立たず、 $M_{\tilde{A}} > |\lambda|$ である。

次に非対角成分が非負の行列 A の場合を扱う。 A の M_A 以外の固有値 η と、対応する固有ベクトル \mathbf{u} を考える。正行列の場合の結果により、

$$|1 + c\eta| < 1 + cM_A \quad (11.37)$$

である¹⁶³。一方、左辺は

$$|1 + c\eta| > \operatorname{Re}[1 + c\eta] = 1 + c\operatorname{Re}\eta \quad (11.38)$$

と評価できる。よって欲しかった不等式 $M_A > \operatorname{Re}\eta$ を得る。□

命題 4 の証明. \tilde{A} を転置した \tilde{A}^\top もまたペロン・フロベニウスの定理の仮定をすべて満たしていることに注意する。 \tilde{A}^\top の固有ベクトルは \tilde{A} の左固有ベクトルである。そのため、 \tilde{A} の固有値 $M_{\tilde{A}}$ の左固有ベクトル \mathbf{w} は、すべてのベクトル成分が正である。

\tilde{A} が、固有値 λ の固有ベクトル \mathbf{v} を持つとする。すると、 $\mathbf{w} \cdot \mathbf{v}$ は、異なる固有値に属する左右の固有ベクトル同士の積なので、定理 2.1 により、この値はゼロとならないといけない。しかし、 \mathbf{w} はすべての成

¹⁶¹ある階数の一般化固有ベクトルに、それより低階の一般化固有ベクトルを加えても、元の階数の一般化固有ベクトルのままである。また、この置き換えにより t の値は変化しない。

¹⁶²これらは一般に複素である。

¹⁶³ $|a^n| = |a|^n$ なので、 n 乗は外した。

分が正なので、 v もすべての成分が正だとすると、 $w \cdot v$ は正の値となり、ゼロにならず矛盾。よって、すべてのベクトル成分が正であるような固有ベクトルは x 以外には存在しない。 \square

12 マルコフ連鎖とサンプリング

12.1 被覆時間

一般の確率過程で、すべての状態を少なくとも一度は訪問するまでにかかる時間の期待値を「被覆時間 (cover time)」という¹⁶⁴。被覆時間は、しらみつぶし探索を乱択アルゴリズムで行っている状況における探索終了時間そのものであるため、いろいろな探索アルゴリズムにおいて重要となる量である。確率過程の被覆時間は以下のように定義する。

定義 12.1 (被覆時間 (cover time)). $\langle \cdot \rangle_x$ で、初期状態を x にとった際の期待値を表す。ある確率過程の被覆時間とは、最も被覆時間が長くなるような初期状態における被覆時間

$$\tau^{\text{cov}} := \max_x \langle \tau^{\text{cov}} \rangle_x \quad (12.1)$$

で定義する。

被覆時間が正確に計算できる例は少ない。以下はその希少な一例を挙げる。

問題 : 1次元周期境界の N サイトのランダムウォーク (± 1 のサイトに確率 $1/2$ で遷移する) を考える。この被覆時間を求めよ。

今、ちょうどこれまでに訪れたサイトの数が $k-1$ から k に増えたとする。ある時刻までに訪れたサイトからなる集合は、この周期境界系のひとつつながりの領域である。ちょうど今、訪れたサイトの数が増えたということは、今この k サイトからなるひとつつながりの領域のちょうど端にいるということである (図 26)。

さて、今いるサイトを 1、その隣のまだ訪れていないサイトを 0、既に訪れたひとつつながりの領域を $1, 2, \dots, k$ 、その次のサイトを $k+1$ とする。すると、これまでに訪れたサイトの数が k から $k+1$ に増えるということは、0 または $k+1$ を訪れるということと同じである。そして、0 または $k+1$ を初めて訪れるまでにかかる時間は、前節で計算した「ギャンブル終了までの平均時間」と全く同じである。よって、訪れたサイトの数が k から $k+1$ に増えるまでに必要な時間の期待値は $T_{1,k+1} = k$ である。これを $k=1$ から $k=N-1$ まで足しあげればよいので

$$\tau^{\text{cov}} = \sum_{k=1}^{N-1} k = \frac{N(N-1)}{2} \quad (12.2)$$

が被覆時間である。

さて、一般の場合には「すべての頂点を訪問する」という条件は複雑でいささか扱いづらい。そこで、もう少し扱いやすい量として「到達時間 (hitting time)」という量を導入する。

定義 12.2 (到達時間 (hitting time)). 今状態 x にいるとする。ここから出発し、状態 y に初めて到達するまでにかかる時間の期待値を「到達時間 (hitting time)」といい $\tau_{x \rightarrow y}^{\text{hit}}$ と書く。

確率過程の到達時間は、もっとも到達時間が長い x と y の組 $\tau^{\text{hit}} := \max_{x,y} \tau_{x \rightarrow y}^{\text{hit}}$ で定義する。

もちろん $\tau^{\text{hit}} \leq \tau^{\text{cov}}$ である。では、 τ^{cov} の上限値を τ^{hit} を用いた形で表せないだろうか。実は幸いなことに、それが可能だという結果が得られている¹⁶⁵。

¹⁶⁴この節の内容は David A. Levin, Yuval Peres, and Elizabeth L. Wilmer, "Markov chains and Mixing Times", AMS の Sec.11 に基づく。

¹⁶⁵以下で示す証明法は、考案者の名前から「マシューズ法 (Matthews method)」とも呼ばれる。

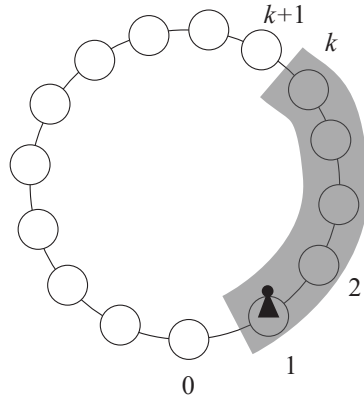


図 26: 1次元周期境界上のランダムウォーク。グレーの領域がすでに訪れたことのあるサイトの集合を表す。

定理 12.1. N 状態の既約マルコフ過程の到達時間と被覆時間は、以下の関係を満たす。

$$\tau^{\text{cov}} \leq \tau^{\text{hit}} \left(\sum_{k=1}^N \frac{1}{k} \right) \quad (12.3)$$

証明. 状態のラベルを $1, 2, \dots, N$ とし、 π をこの上の置換とする。 $\tau_{k,\pi}^{\text{cov}}$ で、 $\pi(1), \pi(2), \dots, \pi(k)$ の状態すべてを訪問するまでにかかる時間を与える確率変数とする¹⁶⁶。もちろん $\tau_{N,\pi}^{\text{cov}}$ は置換 π によらない。我々は、置換 π を一様ランダムに選んだ際の、 $\tau_{k,\pi}^{\text{cov}}$ の平均値の k についての列 $\langle [\tau_{1,\pi}^{\text{cov}}] \rangle_x, \langle [\tau_{2,\pi}^{\text{cov}}] \rangle_x, \dots, \langle [\tau_{N,\pi}^{\text{cov}}] \rangle_x$ の振る舞いを考える。ただし $[\cdot]$ で可能な全置換 π に対する一様平均を表した。

まず $\langle [\tau_{2,\pi}^{\text{cov}}] \rangle_x$ について詳しく見よう。これは二つの状態 $\pi(1)$ と $\pi(2)$ を訪れるのにかかる時間の平均 (π の平均と確率過程の平均の両方) である。我々は、 $\langle [\tau_{1,\pi}^{\text{cov}}] \rangle_x$ と $\langle [\tau_{2,\pi}^{\text{cov}}] \rangle_x$ の差分 $\langle [\tau_{2,\pi}^{\text{cov}} - \tau_{1,\pi}^{\text{cov}}] \rangle_x$ を考察する。このカッコ内の値は、以下のように場合分けして考えることができる。

- もし $\pi(1)$ 到達時点で既に $\pi(2)$ を通過していた場合、 $\tau_{2,\pi}^{\text{cov}} - \tau_{1,\pi}^{\text{cov}} = 0$ である。
- もし $\pi(1)$ 到達時点ではまだ $\pi(2)$ に到達していない場合、 $\langle \tau_{2,\pi}^{\text{cov}} - \tau_{1,\pi}^{\text{cov}} \rangle_x = \tau_{\pi(1) \rightarrow \pi(2)}^{\text{hit}} \leq \tau^{\text{hit}}$ である。

さてここで、可能なすべての置換 π に対する平均をとると、 $\pi(1)$ と $\pi(2)$ のどちらに先に到達するかの確率は完全に $1/2$ になる¹⁶⁷。よって

$$[\langle \tau_{2,\pi}^{\text{cov}} - \tau_{1,\pi}^{\text{cov}} \rangle_x] \leq \frac{1}{2} \cdot 0 + \frac{1}{2} \cdot \tau^{\text{hit}} = \frac{1}{2} \tau^{\text{hit}} \quad (12.4)$$

と上から評価できる。

一般の $\langle [\tau_{k,\pi}^{\text{cov}}] \rangle_x$ の場合も同様に評価できる。この場合、 $\pi(1), \dots, \pi(k-1), \pi(k)$ の k 個の状態の訪問順序と部分被覆時間の差分 $\tau_{k,\pi}^{\text{cov}} - \tau_{k-1,\pi}^{\text{cov}}$ の関係は、

- $\pi(1), \dots, \pi(k-1)$ のどれかが最後である (すでに $\pi(k)$ は通過済み) の場合には $\tau_{k,\pi}^{\text{cov}} - \tau_{k-1,\pi}^{\text{cov}} = 0$
- $\pi(k)$ が最後である場合に限り $\langle \tau_{k,\pi}^{\text{cov}} - \tau_{k-1,\pi}^{\text{cov}} \rangle_x \leq \tau^{\text{hit}}$

となる。 $\pi(k)$ が最後である確率は $1/k$ なので、

$$[\langle \tau_{k,\pi}^{\text{cov}} - \tau_{k-1,\pi}^{\text{cov}} \rangle_x] \leq \frac{k-1}{k} \cdot 0 + \frac{1}{k} \cdot \tau^{\text{hit}} = \frac{1}{k} \tau^{\text{hit}} \quad (12.5)$$

¹⁶⁶ 始状態はどこにとっても構わないので、適当に定めるものとする。

¹⁶⁷ 先に十分長いランダムパスを定め、そのあとで置換 π を決めたと考えれば、この確率が $1/2$ になることは明らかだろう。

である。よって

$$\tau^{\text{cov}} = \sum_{k=1}^N [\langle \tau_{k,\pi}^{\text{cov}} - \tau_{k-1,\pi}^{\text{cov}} \rangle_x] = \sum_{k=1}^N \frac{1}{k} \tau^{\text{hit}} \quad (12.6)$$

と求めたかった関係式を得る¹⁶⁸。 □

12.2 混合時間

物理の数値計算では、ある分布からの状態のサンプリングを行いたいことがよくある¹⁶⁹。それを実現する方法の一つとして、所望の分布を定常分布に持つようなマルコフ過程を考え、適当な状態からそのマルコフ過程に従って時間発展させる、という方法がある。十分待てば欲しい分布に緩和しているので、十分な時間がたった後の状態をサンプルすれば、それは欲しい分布からのサンプリングとみなせるだろう。

しかし問題は、どれくらい待てば「定常分布に緩和した」とみなせるかである。例えば、分布の距離をベクトルの1-ノルム（の半分）で特徴づけることにしよう。特に分布間距離の場合には、これは「全変動距離」と呼ばれる量である。

定義 12.3 (全変動距離 (total variation distance)). 二つの確率分布 \mathbf{p}, \mathbf{q} の間の全変動距離は、状態の集合 S を用いて

$$\|\mathbf{p} - \mathbf{q}\|_{\text{TV}} := \max_S \sum_{i \in S} [p_i - q_i] \quad (12.7)$$

で定義される。

[12-1]. 全変動距離が1-ノルムの半分で与えられることを示せ。また最大を実現する S はどういう集合か示せ。

そうすると、 n ステップ目の状態がどれだけ定常分布へ緩和しているかは、 $\|\mathbf{p}^n - \mathbf{p}^{\text{ss}}\|_{\text{TV}} = \frac{1}{2} \|\mathbf{p}^n - \mathbf{p}^{\text{ss}}\|_1$ で測られる。

定義 12.4 (混合時間 (mixing time)). 最初に確率1である状態 x にいる条件下での、 n ステップ目の確率分布を $\mathbf{p}^{n;x}$ とする。 $d(n)$ を、 n ステップ目の確率分布と定常分布との間の全変動距離が最も大きくなるような初期状態 x における全変動距離とする。

$$d(n) := \max_x \|\mathbf{p}^{n;x} - \mathbf{p}^{\text{ss}}\|_{\text{TV}} \quad (12.8)$$

$d(n)$ が $\varepsilon > 0$ を下回る最初の時刻 n を、精度 ε の下での「混合時間 (mixing time)」という。

$$\tau^{\text{mix}}(\varepsilon) := \min\{n : d(n) \leq \varepsilon\} \quad (12.9)$$

とりうる状態数が $\Omega \sim a^N$ のように振る舞うとき、 $\tau^{\text{mix}}(\varepsilon) = O(N \ln N)$ であれば、このマルコフ連鎖は「高速混合 (rapid mixing あるいは fast mixing)」であるという。

既に収束定理の証明で示しているように、任意の初期状態について適切な $0 < a < 1$ と C が存在し

$$\|\mathbf{p}^{n;x} - \mathbf{p}^{\text{ss}}\|_{\text{TV}} \leq Ca^n \quad (12.10)$$

と書ける。よって、混合時間 $\tau^{\text{mix}}(\varepsilon)$ の ε 依存性は、 $n \rightarrow n \log_a \varepsilon$ の修正で吸収できる程度の差異しかもたらない。そのため、 ε をいくつに設定するのかは特に意味がなく、特定の（適当に定めた） ε における混

¹⁶⁸ ここで形式的に $\tau_{0,\pi}^{\text{cov}} = 0$ と置いた。

¹⁶⁹ 物理量の平衡状態期待値を求めたいならば、平衡分布とみなせる分布から状態のサンプリングを行って、その期待値を計算すればよい。

合時間を求めれば、そのマルコフ過程の収束について十分な特徴づけが出来たことになる¹⁷⁰。

定常分布との距離ではなく、二つの状態 x, y から出発した分布同士の距離を考えることも出来る。 n ステップ目の距離が最大となるような始状態の組における全変動距離を

$$d'(n) := \max_{x,y} \|\mathbf{p}^{n,x} - \mathbf{p}^{n,y}\|_{\text{TV}} \quad (12.11)$$

で定義する。自然に予想されるように、 $d'(n)$ と $d(n)$ は密接に結びついている。

定理 12.2. $d'(n)$ と $d(n)$ は以下の関係を満たす。

$$d(n) \leq d'(n) \leq 2d(n) \quad (12.12)$$

証明. 二つ目の不等式は、1-ノルム（全変動距離）の三角不等式

$$\|\mathbf{p}^{n,x} - \mathbf{p}^{n,y}\|_{\text{TV}} \leq \|\mathbf{p}^{n,x} - \mathbf{p}^{\text{ss}}\|_{\text{TV}} + \|\mathbf{p}^{\text{ss}} - \mathbf{p}^{n,y}\|_{\text{TV}} \quad (12.13)$$

から直ちに従う。

一つ目の不等式を示すため、 \mathbf{p}^{ss} が定常分布であることより従う関係式

$$p_i^{\text{ss}} = \sum_j p_i^{n,j} p_j^{\text{ss}} \quad (12.14)$$

を用いる。ただし $p_i^{n,j}$ は $\mathbf{p}^{n,j}$ の i 成分目を表す。これにより、

$$\|\mathbf{p}^{n,x} - \mathbf{p}^{\text{ss}}\|_{\text{TV}} = \left\| \sum_j (\mathbf{p}^{n,x} - \mathbf{p}^{n,j}) p_j^{\text{ss}} \right\|_{\text{TV}} \leq \sum_j p_j^{\text{ss}} \|\mathbf{p}^{n,x} - \mathbf{p}^{n,j}\|_{\text{TV}} \leq \max_y \|\mathbf{p}^{n,x} - \mathbf{p}^{n,y}\|_{\text{TV}} \quad (12.15)$$

が成り立つことから従う。ただし一つ目の不等式は、三角不等式及び全変動距離の線形性を用いている。□

[12-2]. 以下の不等式が $n \leq m$ で成り立つことを示せ。

$$\|\mathbf{p}^{n,x} - \mathbf{p}^{n,y}\|_{\text{TV}} \geq \|\mathbf{p}^{m,x} - \mathbf{p}^{m,y}\|_{\text{TV}} \quad (12.16)$$

12.3 カップリング

具体的な系で混合時間を計算する際の実用的なツールとして、「カップリング」という手法がある¹⁷¹。カップリングそのものはより広い概念¹⁷² だが、ここではマルコフ過程に対する以下の性質を持つカップリングに限定する。

定義 12.5 (カップリング (coupling)). あるマルコフ過程の「カップリング」とは、二つの確率変数 (X^n, Y^n) という組に対するマルコフ過程で、以下を満たすものをいう。

- 一方の確率変数のみを見た場合、その挙動は元のマルコフ過程と完全に一致する。

¹⁷⁰例えば David A. Levin, Yuval Peres, and Elizabeth L. Wilmer, "Markov chains and Mixing Times", AMS では $\varepsilon = 1/4$ が用いられている。

¹⁷¹この節の内容は、Cristopher Moore and Stephan Mertens, "The Nature of Computation", Oxford university press, Sec.12.4-5, David A. Levin, Yuval Peres, and Elizabeth L. Wilmer, "Markov chains and Mixing Times", AMS, Sec.5 に基づく。

¹⁷² Ω 上の二つの確率分布 \mathbf{p}, \mathbf{q} のカップリングとは、 $\Omega \times \Omega$ 上の確率分布 $P(i, j)$ で、その周辺分布がそれぞれ \mathbf{p} と \mathbf{q} になる、つまり $\sum_j P(i, j) = p_i$ 、 $\sum_i P(i, j) = q_j$ を満たすものをいう。一般には和は積分である。

- ある m において $X^m = Y^m$ が満たされたならば、以降の任意の $n \geq m$ においても $X^n = Y^n$ が成り立つ。

要するに、 X または Y 単独で見るとそれぞれが勝手なマルコフ過程に従っているように見えるが、実際には相関を持って動いている二つのマルコフ過程のことである。「相関を持つ」というのは、例えば X と Y で共通の乱数を用いるということである。特に $X^m = Y^m$ が一度実現したならば、その後は完全に同じ時間発展をするので、両者は共通の乱数である。 $X^m = Y^m$ となる前であっても、両者は共通の乱数に基づく時間発展をしていて構わない。特にすぐ後で見ると、素早く $X^m = Y^m$ が実現してくれればくれるほど、元のマルコフ過程の早い混合が示せるので、 $X^m = Y^m$ が短時間で実現するような上手なカップリングをいかに作るかがカギとなる。

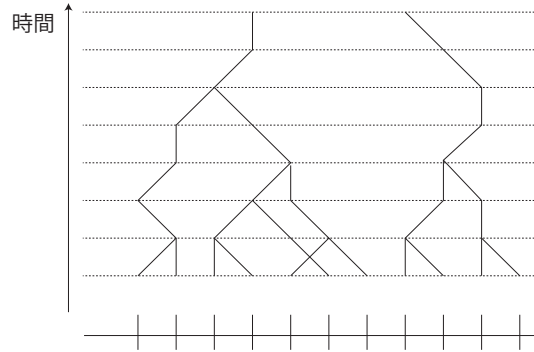


図 27: 1次元ランダムウォークの場合のカップリングのイメージ図。一度合流すると、あとは同じランダムウォークとして振る舞う。

$X^m = Y^m$ が満たされる最小の時刻 m を「結合時刻¹⁷³ (coupling time)」と呼び、 τ^{coup} と表す。結合時刻は混合時間と密接な関係がある。

定理 12.3. x および y から出発した確率分布の間の時刻 n での全変動距離は、任意のカップリングについて、 x および y から出発した際の結合時刻が n 以上である確率を下回る。

$$\|\mathbf{p}^{n,x} - \mathbf{p}^{n,y}\|_{\text{TV}} \leq P[\tau^{\text{coup}} > n | x, y] \quad (12.17)$$

さて、定理 12.2 で示したように

$$d(n) = \max_x \|\mathbf{p}^{n,x} - \mathbf{p}^{\text{ss}}\|_{\text{TV}} \leq \max_{x,y} \|\mathbf{p}^{n,x} - \mathbf{p}^{n,y}\|_{\text{TV}} = d'(n) \quad (12.18)$$

が成り立つので、式 (12.17) は

$$d(n) \leq \max_{x,y} P[\tau^{\text{coup}} > n | x, y] \quad (12.19)$$

という形で、結合時刻と混合時間は結び付く。

式 (12.17) が成り立つのは、直観的には以下のように理解できる。 x を出発したマルコフ連鎖 X と、 y を出発したマルコフ連鎖 Y とのカップリングで全変動距離を測る。もしこの二つが同じ状態にいるならば、その事象の全変動距離への寄与はゼロである（同一の状態の確率の値を押し上げる効果しかないため）。よって全変動距離に有限の寄与を持ちうるのは、まだ X と Y が結合していない事象だけである。 n ステップ目にまだ X と Y が結合していない確率は $P[\tau^{\text{coup}} > n | x, y]$ であるため、これで全変動距離が押さえられる。

この直観的説明をきちんと示したければ結合分布を利用する。

証明. このカップリングの下での n ステップ目の確率分布を $p_{i,j}^n$ と書く（初期状態依存性は省略）。カップリングの定義により、 $\sum_j p_{i,j}^n = p_i^{n,x}$ かつ $\sum_i p_{i,j}^n = p_j^{n,y}$ が成り立つ。全変動距離は 1-ノルムの半分に一致

¹⁷³ 「合体時刻 (coalescence time)」ともいう

するので、

$$\|\mathbf{p}^{n,x} - \mathbf{p}^{n,y}\|_{\text{TV}} = \frac{1}{2} \|\mathbf{p}^{n,x} - \mathbf{p}^{n,y}\|_1 = \frac{1}{2} \sum_i \left| \sum_j p_{i,j}^n - p_{j,i}^n \right| \leq \sum_i \sum_{j(\neq i)} |p_{i,j}^n| \quad (12.20)$$

と上から押さえられる。ところで、 $\sum_i \sum_{j(\neq i)} |p_{i,j}^n|$ は「 $X^n \neq Y^n$ である確率」に等しいが、これは「まだ X と Y が出会っていない確率 $P[\tau^{\text{coup}} > n|x, y]$ 」そのものである。□

カップリングをどのように用いるのか、まずは簡単な具体例で見てみよう。この例ではわざわざカップリングのような高級な手法を用いなくても解くことは出来るが、カップリングのデモとしてあえてカップリングを用いて解いてみる。

問題：超立方体上のランダムウォーク： d 次元超立方体の頂点上のランダムウォークを考える。このウォークでは、確率 $1/2$ で今いる頂点に留まり、 d 個ある隣接頂点に確率 $1/2d$ で移動する。このウォークの混合時間を求めよ。

表記の都合上、頂点を各成分が $\{0, 1\}$ をとる d 次元ベクトル $(0, 0, \dots, 0), (1, 0, \dots, 0), \dots, (1, 1, \dots, 1)$ でラベルする。状態は $X = (x_1, \dots, x_d)$ のように書ける。カップリングとしては、以下のような X と Y のカップリングを用いる。まず d 個ある向き (d 次元ベクトルのどの変数を見るか) i を等確率 $1/d$ で選ぶ。この i は X と Y で共通で用いる。次に、確率 $1/2$ で 0 に、確率 $1/2$ で 1 に状態を動かす。(例えば今が状態 1 ならば、 0 と出た場合には状態を 0 に動かし、 1 と出た場合には動かさない)。この動かし方も X と Y で共通で用いる。この構成で、(1) X または Y 単独で見たら元のマルコフ連鎖と同じになること、(2) 一度 $X = Y$ が実現したらあとはずっと $X = Y$ が実現すること、の二条件は満たされている。

さて、もしある時にある i で $x_i = y_i$ が成り立ったならば、以降は必ず $x_i = y_i$ が成り立つ。つまり、 i 番目の変数はロックされて以降は完全に一致する。なので、カップリング (X, Y) の確率過程において、選ばれる向き i として $1, \dots, d$ のすべての向きが出現したら、 X と Y は結合する。そのため、この問題はクーポンコレクター問題と完全に一致する¹⁷⁴。式 (12.19) と式 (11.26) を組み合わせることで、

$$d(d \ln d + cd) \leq P[\tau > d \ln d + cd] \leq e^{-c} \quad (12.21)$$

という関係が成り立つことが分かる。ここから混合時間は

$$\tau^{\text{mix}}(\varepsilon) \leq d \ln d + d \ln \frac{1}{\varepsilon} \quad (12.22)$$

と評価できる。特にこれは高速混合である。

超立方体上のランダムウォークの場合、単調な量 (すでに選ばれた向きの数) で特徴づけが出来たので、あまり難しくなかった。次に、もう少し非自明な例を見てみよう。

与えられたグラフの彩色 (coloring) を考える。彩色とは、隣り合う (辺で結ばれた) 頂点同士は異なる色で塗らなければいけないという制限の下で、使用してよい色を用いて全頂点を塗ることを指す。さてここで、与えられた k 色を用いた可能な彩色すべてを等確率で生成するようなサンプリングを行いたいとしよう。統計力学ならば等重率、マイクロカノニカル分布に相当する。どのようにすればこのサンプリングはできるだろうか。

まず最初に注意しないといけないのは、「まだ色を塗っていない頂点を等確率で選び、その頂点を塗ることが出来る色を等確率で選んで塗る」という方法は、一見やさそうだが、実は可能な彩色すべての等確率なサンプリングにはならない、という点である¹⁷⁵。そこで我々が用いるのが、「一つのグラフの塗り方」をマルコフ連鎖の一つの状態とみなし、全彩色が等確率である分布が定常分布となるような彩色間のマルコフ連鎖を走らせることである。ある彩色から出発し、マルコフ連鎖のステップ数を十分に進めた後でその時点の彩色をサンプルすれば、それは等確率サンプリングになっているはずである。特に、彩色間マルコフ連鎖として以下のルールを用いる。以下、頂点数を N 、使用可能な色の種類を k とする。

彩色のマルコフ連鎖：頂点 v を全頂点から等確率 $1/N$ で、色 c を全色から等確率 $1/k$ で、それぞれ選ぶ。頂点 v に色 c を塗ることが出来る (v の隣接頂点に色 c のものがない) ならば、頂点 v を色 c にする。そうでないならば、状態を変化させない。

¹⁷⁴例えば、平均して $d \sum_{k=1}^d \frac{1}{k} \simeq d \ln d$ ステップで X と Y は結合すると分かる。

¹⁷⁵例えば A-B-C という形の 3 頂点のグラフを 1,2,3 の三色で彩色する状況を考えて、等確率サンプリングだと両端 (A と C) の色が一致する確率は $1/2$ だが、このアルゴリズムに従うサンプリングだと $4/9$ になる。

このマルコフ過程は、一色だけ異なる彩色間の遷移確率をすべて $1/Nk$ にとったものである。そのため、このマルコフ過程の定常分布は、確かに実現させたい「すべての彩色が等確率で出現する分布」になっている。

問題：この彩色のマルコフ連鎖が高速混合であることを示せ。

与えられたグラフの最大次数¹⁷⁶ を D と表すことにする。我々はまず $k > 4D$ という簡単な場合から考察する (k が小さい場合の取り扱い は次節以降で行う)。二つの彩色の間の距離 d として、「ハミング距離 (Hamming distance)」、すなわち両彩色の間で異なる色が塗られている頂点の数をを用いる。カップリングとして、以下のマルコフ過程を考える。

彩色のカップリング：二種類の彩色 X と Y に対するマルコフ過程を以下のように定める。頂点 v を全頂点から等確率で、色 c を全色から等確率で、それぞれ選ぶ。 X 及び Y において、頂点 v に色 c を塗ることが出来る (v の隣接頂点に色 c のものがない) ならば、頂点 v を色 c にし、そうでないならば、状態を変化させない。

これがカップリングであることは容易に確認できる。また、1 ステップ進む際のハミング距離の変化は、以下のように評価できる。

- 確率 d/N で、 X と Y の間で異なる色に塗られている頂点 v が選ばれる。それぞれの彩色において、頂点 v が接する頂点の色の総数は D 色以下なので、色 c の選択においては、 $(k - 2D)/k$ 以上の確率で X と Y どちらにおいても頂点 v を塗ることのできる色が選ばれる。このとき、ハミング距離は $d \rightarrow d - 1$ と変化する。それ以外の色が選ばれた場合にはハミング距離は変化しない。
- Dd/N 以下の確率で、以下の条件を満たす頂点 w が選ばれる。(i) w は X と Y で同じ色に塗られている。(ii) w の隣接頂点 v で、 X と Y の間で異なる色に塗られている頂点 v がある。 X と Y それぞれで v に塗られている色を c_X, c_Y とする。もしこの頂点 w において、塗る色として $c = c_X$ または $c = c_Y$ が選ばれると、 X か Y 一方では w の色が c に変化するが、他方では元の色に留まる。このとき、ハミング距離は $d \rightarrow d + 1$ と変化する。それ以外の場合にはハミング距離は変化しない¹⁷⁷。
- それ以外の場合には、ハミング距離は変化しない。

よって、1 ステップでのハミング距離の変化の期待値は

$$\mathbb{E}[\Delta d] \leq -\frac{d}{N} \cdot \frac{k - 2D}{k} + \frac{Dd}{N} \cdot \frac{2}{k} = -\frac{(k - 4D)d}{kN} \quad (12.23)$$

である ($k > 4D$ のため右辺は負である点に注意)。以下見やすくするために $A := (k - 4D)/k > 0$ と置く。よって n ステップ目の状態の彩色の一様分布 π までの全変動距離は、マルコフの不等式を用いて

$$\|p^n - \pi\|_{\text{TV}} \leq P[d \geq 1] \leq \mathbb{E}[d] \leq Ne^{-A/N \cdot n} \quad (12.24)$$

と評価できる。これは混合時間が

$$\tau^{\text{mix}}(\varepsilon) \leq \frac{1}{A}(N \ln N - N \ln \varepsilon) \quad (12.25)$$

と表せる、すなわち高速混合であることを示している。

[12-3]. 式 (12.24) の最後の不等式を示せ。

12.4 パスカップリング

前節の彩色についての結果は、 $k > 4D$ の場合にしか成り立たなかった (そうでないと A が負になってしまう)。しかし、もう少し工夫した議論を行うことで、同一のマルコフ過程が $k > 3D$ の場合にも高速混合であることを示すことが出来る。それが「パスカップリング (path coupling)」と呼ばれる手法である¹⁷⁸。

¹⁷⁶9.4 節で導入したように、その頂点から出ている辺の本数を次数という。

¹⁷⁷頂点 w が、 XY 間で異なる色で塗られている別の頂点 v' とも接している場合には、 v' の色が選ばれた場合にもハミング距離は増える。しかし、このケースは頂点 v' の隣接頂点の処理としてすでに行われているため、特に v の処理として考える必要はない。

¹⁷⁸この節の内容は、David A. Levin, Yuval Peres, and Elizabeth L. Wilmer, "Markov chains and Mixing Times", AMS, Sec.14, Christopher Moore and Stephan Mertens, "The Nature of Computation", Oxford university press, Sec.12.5 に基づく。

パスカップリングでは、距離としてハミング距離ではなく状態空間中の変動距離（彩色 x から彩色 y に、途中がすべて合法的（隣接頂点の塗り方が異なる）な状態で塗り替えるのに必要なステップ数）を用いる（図 28）。そして、任意の二つの彩色のペアではなく、状態空間中で隣接し合う彩色同士（＝一頂点だけ塗り替えたなら一致するような彩色同士）の間の距離の変化を考察する。少しあとで示すように、実は一般にカップリングの議論では、隣り合う状態同士の間の変動距離の変化だけ考察すれば十分であることが分かっている。これはカップリングの議論を大幅に楽にしてくれる重要な事実である。

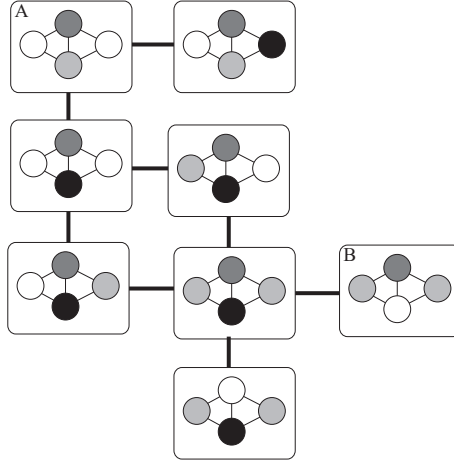


図 28: パスカップリングを考える際の状態空間。一つの塗り方が一つの状態に対応し、合法的な塗り替えで到達できる最短経路の距離で、二つの塗り方間の距離を定義している。例えば図の A と B の塗り方の場合、ハミング距離は 3 だが、今の距離の定義では距離は 4 である。

一頂点 v だけ色が違い、他の頂点はすべて色が一致している彩色ペア X と Y を考える。この場合の変動距離 d の変化は、以下のように評価できる。

- 確率 $1/N$ で頂点 v が選ばれる。 v に隣接する頂点の色は D 色以下なので、 $(k - D)/k$ 以上の確率で頂点 v を塗れる色 c が選ばれる。この場合、変動距離は $d = 1$ から $d = 0$ になり、 X と Y は一致する。 v に隣接する頂点の色が選ばれた場合には、状態は変化せず、変動距離も変化しない。
- D/N 以下の確率で頂点 v の隣接頂点を選ばれる。確率 $2/k$ で、 v の色 (c_X または c_Y) が塗る色 c として選ばれる。このとき、変動距離は $d = 1$ から $d = 2$ へと変化する。その他の色が選ばれた場合には、変動距離は変化しない。
- その他の頂点を選ばれた場合には、変動距離は変化しない。

これをまとめると、変動距離 d の変化の期待値は

$$\mathbb{E}[\Delta d] \leq -\frac{1}{N} \cdot \frac{k - D}{k} + \frac{D}{N} \cdot \frac{2}{k} = -\frac{k - 3D}{kN} \quad (12.26)$$

であり、 $k > 3D$ であれば右辺は負である。すなわち、平均して X と Y は近づく。以下、 $B = (k - 3D)/k > 0$ と置く。

では、隣接状態間の場合の結果を用いて、一般の距離 d だけ離れた二つの彩色 $X = x$ と $Y = y$ についての評価を行おう。 x と y の間の距離が d ということは、何らかの彩色 z_1, \dots, z_{d-1} が存在し、 $x - z_1 - z_2 - \dots - z_{d-1} - y$ が隣接する状態をつないだパスになるように出来るということである。さて、始状態が $Z_i = z_i$ ($1 \leq i \leq d-1$) となる $d-1$ 個の確率変数を導入し、これらを X, Y とともに 1 ステップ時間発展させることにしよう。時間発展のルールは、カップリングのものを用いる（共通の v, c での時間発展）。

さて、 $X - Z_1$ 間、 $Z_i - Z_{i+1}$ 間、 $Z_{d-1} - Y$ 間はすべて隣接した彩色なので、これらの間の変動距離 d の変化の期待値は $-B/N$ である。1 ステップ時間発展後の確率変数を X^1, Y^1, Z_i^1 のように表すことにする。すると変動距離の三角不等式より、

$$\mathbb{E}[d(X^1, Y^1)] \leq \mathbb{E}\left[\sum_{i=0}^{d-1} d(Z_i^1, Z_{i+1}^1)\right] = d(x, y) - \frac{B}{N}d(x, y) \quad (12.27)$$

が得られる。あとは前節と同様にして、混合時間は、変動距離の最大値 d_{\max} を用いて

$$\tau^{\text{mix}} \leq \frac{1}{B}(N \ln d_{\max} - N \ln \varepsilon) \quad (12.28)$$

と上から評価できる。変動距離の最大値 d_{\max} は $O(N)$ の量なので、上の結果は高速混合を示している。

12.5 <補論>： $k > 2D$ の場合の混合時間

より工夫した方法を用いれば、 $k > 2D$ の場合の高速混合を示すことも出来る。この節ではその方法と、併せてパスカップリングの考え方の柔軟性を少し見たいと思う。

今までのカップリングでは、 X と Y は完全に対等な塗り方をしてきた。しかし、非対称な取り扱いであっても、カップリングにすることは出来る。そして、 $k > 2D$ の場合を扱う際には、そのような非対称なカップリングが活用される。

一頂点 w だけ塗り方が違う彩色 X と Y を考える。 X および Y での頂点 w の色を c_X および c_Y と書くことにする。今、 w に隣接する頂点 v が、塗り替える頂点に選ばれたとする。このとき、以下の塗り方を行う。

乱数 $r \in \{1 \sim k\}$ を等確率で選ぶ。 $3 \sim k$ から c_X, c_Y を除いた $k - 2$ 色への一対一写像 f をあらかじめ定めておく

- 1 が出た場合、 X では v を c_X に、 Y では v を c_Y に塗ろうとする。
- 2 が出た場合、 X では v を c_Y に、 Y では v を c_X に塗ろうとする。
- それ以外の数 r が出た場合、 X, Y ともに v を $f(x)$ に塗ろうとする。

これがカップリングであることは容易に確認できる。一方、変動距離 d が 1 から 2 に増えてしまう望ましくない色の選び方の出現確率は、前節のカップリングだと $2/k$ だったのに対し、このカップリングだと $1/k$ 以下に押さえられている。具体的には、 $r = 2$ が出た場合には変動距離 d が 1 から 2 に増えうる¹⁷⁹ 一方、 $r = 1$ が出た場合には変動距離 d は 1 のままに留まる。変動距離が増える確率が半減できたのは、結局、 X における「望ましくない塗り方」は v を c_Y で塗るもの、 Y における「望ましくない塗り方」は v を c_X で塗るものなので、両方の望ましくない塗り方を一まとめにしたためである。

以上より、隣接した彩色間の変動距離 d の変化の期待値は

$$\mathbb{E}[\Delta d] \leq -\frac{1}{N} \cdot \frac{k - D}{k} + \frac{D}{N} \cdot \frac{1}{k} = -\frac{k - 2D}{kN} \quad (12.29)$$

であり、 $k > 2D$ であれば右辺は負である。

ここまでの議論は問題ないだろうが、ここから一般の二彩色間の議論に移るところはきちんと考える必要がある。前節のパスカップリングでは、彩色同士が互いに隣接するように間に Z_1, \dots, Z_{d-1} という確率変数を補い、一斉に時間発展させて隣接する確率変数間の距離が縮むことを利用して、一般の二彩色間の距離についての評価を与えた。だが、今回は取り扱いが非対称なうえ、隣接する状態に応じて遷移のルールが決まっているので、このようなナイーブな考え方はそのままは上手くいかない。「そもそもカップリングとは何か」にまで立ち返って、何を示せばよいのか、をきちんと考える必要がある。

これまでのカップリングの時間発展はすべて、「共通の乱数を生成し、それを用いて X と Y の時間発展ルールをそれぞれ与える」という説明をしていた。しかしこれはあくまでも直観的な分かりやすさのためであり、このような言い方をする（出来る）必要はない。 $(X, Y) = (a, b)$ が 1 ステップ後に (a', b') である遷移確率を $R_{(a', b'), (a, b)}$ と表すことにすると、これがカップリングであるための条件は

$$\sum_{b'} R_{(a', b'), (a, b)} = R_{a', a} \quad (12.30)$$

が任意の a, a', b で成り立ち、かつ

$$\sum_{a'} R_{(a', b'), (a, b)} = R_{b', b} \quad (12.31)$$

¹⁷⁹「増える」ではなく「増えうる」なのは、 w 以外の v の隣接頂点に c_X または c_Y で塗られたものがある場合、 $r = 2$ でも d が増えない場合があるからである。

が任意の a, b, b' で成り立つことである。ただし R_{ij} は元のマルコフ過程の遷移確率である。この条件さえ満たされていればいいので、共通の乱数を使い回す形で時間発展を生成する必要はないし、それどころか今の状態 (a, b) に依存してルールが大きく異なっても構わない。

少し前に具体的に構成したように、すべての近接ペア (a, b) については、適切に変動距離が縮まるような適切なカップリングの遷移確率を定めることに成功している。その遷移確率 R を利用して、一般の状態ペア (a, b) に対する遷移確率を以下のように構成する。

a と b をつなぐ最短経路（複数あるならばその一つ¹⁸⁰）を $a - z_1 - z_2 - \dots - z_{d-1} - b$ とする。表記の都合上、 $z_0 = a, z_d = b$ とする。これを利用して、

$$R_{(a', b'), (a, b)} = \sum_{z'_1, \dots, z'_{d-1}} \frac{R_{(a', z'_1), (a, z_1)} R_{(z'_1, z'_2), (z_1, z_2)} R_{(z'_2, z'_3), (z_2, z_3)} \cdots R_{(z'_{d-1}, b'), (z_{d-1}, b)}}{R_{z'_1, z_1} R_{z'_2, z_2} \cdots R_{z'_{d-1}, z_{d-1}}} \quad (12.32)$$

と定義する。イメージとしては、遷移確率 $R_{(z'_i, z'_{i+1}), (z_i, z_{i+1})}$ を「 (z'_i, z_i) 」と「 (z'_{i+1}, z_{i+1}) 」がそれぞれ行と列を指定する行列とみて、行列の積をとっている状況である。すると、右辺の和の中身は、確率変数 $X, Z_1, \dots, Z_{d-1}, Y$ が、それぞれ $a, z_1, \dots, z_{d-1}, b$ という状態にあるところから、 $a', z'_1, \dots, z'_{d-1}, b'$ という状態に遷移する確率を与えており、しかも単独の隣接ペア (Z_i, Z_{i+1}) を見ると、その遷移確率は先程構成した隣接ペアに対する遷移確率そのものになっている¹⁸¹。そのため、この遷移確率に従って $X, Z_1, \dots, Z_{d-1}, Y$ が遷移すると考えれば、前節のパスカップリングと同じ論法が適用でき、三角不等式を用いることで任意の彩色の組 (a, b) について、変動距離の変化の期待値が評価できる。今回の場合ならば、 $C = (k - 2D)/k$ と置いて

$$\tau^{\text{mix}} \leq \frac{1}{C} (N \ln d_{\max} - N \ln \varepsilon) \quad (12.33)$$

という評価が得られる。

¹⁸⁰あとでも注意しているように、この導出で用いる時間発展のルールは、あくまでも変動距離の評価のためだけに用いられるもので、実際のカップリングの時間発展のルールとは異なっていて構わない。そのため、いろいろなペアごとの最短経路の取り方の整合性などは一切気にする必要がない。

¹⁸¹カップリングの条件 $\sum_{z'_i} R_{(z'_i, z'_{i+1}), (z_i, z_{i+1})} = R_{z'_{i+1}, z_{i+1}}$ を繰り返し適用することで確認できる。

13 ガウス積分とラプラス近似

物理学などで出てくる確率計算の問題設定では、何らかの意味で分布が特定の値に鋭いピークを持つ状況が大半である¹⁸²。例えば統計力学では、物理量の分布は鋭いピークを持つことが常であり、これは「マクロな物体のマクロな物理量はほとんど確実に特定の値をとる」ことの反映である。他にも、長時間平均がほとんど確実に特定の値に落ち着く状況や、情報科学であればデータが大量にあるので特定の値に収斂している状況など、このような「分布が鋭いピークを持つ」状況は頻繁に出現する。

この章では、ピークを持つ分布の典型例であるガウス分布とガウス積分を扱い、特に分布が鋭い状況での近似手法である鞍点近似を学ぶ。

13.1 多変数ガウス積分

一変数のガウス積分は、1年生の重積分の練習問題としてすでに学んでいるはずである。確認のために結果を書いておく。

定理 13.1 (ガウス積分 (Gaussian integral)). $a > 0$ に対し、以下が成り立つ¹⁸³

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (13.1)$$

証明. 式 (13.1) の積分の値を I とすると、極座標に変数変換して

$$I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a(x^2+y^2)} = \int_0^{\infty} dr \int_0^{2\pi} r d\theta e^{-ar^2} = 2\pi \int_0^{\infty} dr r e^{-ar^2} = \frac{\pi}{a} \quad (13.2)$$

となる。全体のルートをとることで、求めたい式 (13.1) を得る。□

ガウス積分は積分範囲が $-\infty$ から ∞ であり、また両端では被積分項はすみやかにゼロに減衰するので、 $x \rightarrow x+t$ と変数をシフトさせてもガウス積分の値は変わらない。この事実を利用すると、指数の方に1次の項が加わった場合

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}ax^2+bx} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{a}{2}\left(x-\frac{b}{a}\right)^2+\frac{b^2}{2a}} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{2a}} \quad (13.3)$$

と計算できる。ただし係数 $\frac{1}{2}$ は今後の計算をきれいにするためにつけた。

では多変数の場合のガウス積分に進もう。多変数の場合、指数の肩は x_1, x_2, \dots の二次以下の多項式である。特に二次の項たちは、二次形式の理論により実対称行列 A を用いて $\frac{1}{2}\mathbf{x}^T A \mathbf{x}$ の形にまとめられる(??節参照)。ただし再び係数 $\frac{1}{2}$ は後の計算をきれいにするためにつけた。同様に一次の項は、実ベクトル \mathbf{b} を用いて $\mathbf{b}^T \mathbf{x}$ とまとめられる。これらの表示を用いて、式 (13.3) と同様に多変数ガウス積分は以下のように計算できる。

定理 13.2 (多変数ガウス積分). \mathbf{x} を n 変数ベクトルとする。 $n \times n$ の正定値実対称行列 A に対し、以下が成り立つ。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x}} = \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{\det A}} e^{\frac{1}{2}\mathbf{b}^T A^{-1} \mathbf{b}} \quad (13.4)$$

¹⁸² どちらかという、そのような値の集中が起きていないマクロな対象はそもそも扱いようがないともいえる。我々が関心を持つ物理の対象は、何らかの意味で普遍性を有しているのが常であり、マクロな物体についての普遍性は「ミクロには多様だが、マクロに見ると常に特定の性質を示す」のような形をとることがほとんどである。

¹⁸³ これは積分区間が $-\infty$ (あるいは 0) から ∞ だから計算できる。不定積分 $\int dx e^{-ax^2}$ は初等関数の範囲では積分できないことが知られている。

一変数の場合には二次の係数は正である必要があったが、多変数の場合には二次の係数は正定値行列である必要がある（正定値行列は3章で既に見た）。

証明. まず一次の項がない場合を考えよう。 n 次元空間全体の積分 $\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x}$ は、どの正規直交基底に沿った向きでも結果は同じである。そこで、 A の規格化された固有ベクトル $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ を基底に用いることにしよう。対応する A の固有値は $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ とする。この基底に沿わせて $\mathbf{x} = \sum_i y_i \mathbf{v}_i$ と書くと、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x} e^{-\frac{1}{2} \mathbf{x}^\top A \mathbf{x}} &= \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} e^{-\frac{1}{2} \sum_i y_i \mathbf{v}_i^\top A \sum_j y_j \mathbf{v}_j} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} e^{-\frac{1}{2} \sum_i \lambda_i y_i^2} \\ &= \sqrt{\prod_i \frac{2\pi}{\lambda_i}} \\ &= \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{\det A}} \end{aligned} \tag{13.5}$$

と計算できる。

一次の項がある場合は、一変数の場合と同様に平方完成すればよい。具体的には

$$-\frac{1}{2} \mathbf{x}^\top A \mathbf{x} + \mathbf{b}^\top \mathbf{x} = -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - A^{-1} \mathbf{b})^\top A (\mathbf{x} - A^{-1} \mathbf{b}) + \frac{1}{2} \mathbf{b}^\top A^{-1} \mathbf{b} \tag{13.6}$$

と計算できる。一変数の場合と同様に、変数の並進シフトはガウス積分の結果を変えない。これらの事実を組み合わせることで欲しかった結果を得る。□

確率変数の分布が $P(\mathbf{x}) = C \cdot e^{-\mathbf{x}^\top A \mathbf{x} / 2}$ 、あるいは多変数ならば $P(\mathbf{x}) = C \cdot e^{-\mathbf{x}^\top A \mathbf{x} / 2}$ と書けるとき、この確率分布を「ガウス分布 (Gaussian distribution)」という（一次以下の項が指数の肩に含まれていてもよい）。ただし C は規格化のための定数である。

以下、

$$\langle Z \rangle := \int d\mathbf{x} Z(\mathbf{x}) P(\mathbf{x}) \tag{13.7}$$

で Z の平均値を表す。なおここで、 $\int d\mathbf{x}$ は多変数 \mathbf{x} の積分 $\int dx_1 \int dx_2 \cdots$ を表す。

定義 13.1 (分散・共分散). 一般の確率分布について、

$$\langle \Delta x_i^2 \rangle := \int d\mathbf{x} \Delta x_i^2 P(\mathbf{x}), \quad \langle \Delta x_i \Delta x_j \rangle := \int d\mathbf{x} \Delta x_i \Delta x_j P(\mathbf{x}) \tag{13.8}$$

を、それぞれ変数 x_i の「分散 (variance)」、変数 x_i と x_j の間の「共分散 (covariance)」という。ただし $\Delta x_i := x_i - \langle x_i \rangle$ は平均からのずれである。

定理 13.3. ガウス分布 $P(\mathbf{x}) = C \cdot e^{-\mathbf{x}^\top A \mathbf{x} / 2}$ において、変数 \mathbf{x} の分散・共分散¹⁸⁴は、 A の逆行列と一致する。

$$\langle x_i x_j \rangle = (A^{-1})_{ij} \tag{13.9}$$

一変数の場合には、平均ゼロ、分散 σ のガウス分布は $C \cdot e^{-x^2/2\sigma}$ という形をしていたことを基礎統計で習ったと思うが、これはその自然な拡張になっている。なお、確率分布が一次以下の項を伴っている場合は、適宜原点をシフトさせて計算すればよい。

¹⁸⁴二次項のみのガウス分布は平均がゼロなので、平均からのずれ Δx_i と x_i そのものは一致する。

証明. $A = VDV^\dagger$ とユニタリ対角化 (今は実行列なので直交対角化) されるとする。ただし D は対角行列 $\text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ とする。積分変数として $\mathbf{y} = V^\dagger \mathbf{x}$ を用いることにする。すると計算したい共分散は

$$\langle x_i x_j \rangle = C \cdot \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} (V\mathbf{y})_i (V\mathbf{y})_j e^{-\frac{1}{2} \sum_k \lambda_k y_k^2} \quad (13.10)$$

と表せる。変数 y_i たちは独立な一変数のガウス分布の直積なので

$$C \cdot \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} y_i y_j e^{-\frac{1}{2} \sum_k \lambda_k y_k^2} = \frac{1}{\lambda_i} \delta_{ij} \quad (13.11)$$

である。これを式 (13.10) に代入すると

$$C \cdot \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} (V\mathbf{y})_i (V\mathbf{y})_j e^{-\frac{1}{2} \sum_k \lambda_k y_k^2} = \sum_m V_{im} V_{jm} \frac{1}{\lambda_m} = (VD^{-1}V^\dagger)_{ij} = (A^{-1})_{ij} \quad (13.12)$$

と求めたかった結果を得る。 □

[13-1]. 2変数の確率分布 $P(x, y) = C \exp(-6x^2 - 4xy - 9y^2 + 4x - 2y)$ を考える。これが確率分布となるように係数 C を定めたいので、この分布における x の分散と xy 間の共分散を求めよ。

13.2 複素ガウス積分

では次に、ガウス積分の係数を複素数に拡張しよう。複素数のガウス積分は、経路積分や場の量子論の計算で頻出する。また、フーリエ変換を用いている場合にも複素ガウス積分が現れる。

結果からいうと、係数が複素数になっても、これまでの結果はそのまま成り立つ。

定理 13.4 (複素ガウス積分). α を実部が正の複素数、 β を任意の複素数とする。このとき以下が成り立つ¹⁸⁵。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha(x-\beta)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (13.13)$$

証明は、 β の複素数への拡張と、 α の複素数への拡張とに分ける。

β の複素数への拡張の証明. a を実数、 $\beta = -ib$ (b は実数) とする¹⁸⁶。被積分関数の引数 x を、複素数 z に拡張する。 z の関数 e^{-az^2} が複素平面全域で極を持たないことに注意する。

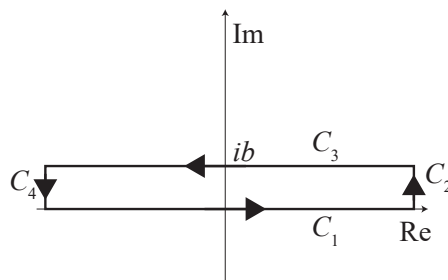


図 29: $\beta = ib$ の場合の計算のための複素積分の経路。

¹⁸⁵ 複素数の平方根は、 $\alpha = re^{i\theta}$ に対し $\sqrt{\alpha} = \sqrt{r}e^{i\theta/2}$ と定義する。

¹⁸⁶ β の実部が効かないのは、実数の場合の並進シフトがガウス積分の値を変えないことによって示されている。よって β が虚部だけの場合を考えれば十分である。

e^{-az^2} に対し、図 29 のような積分経路 C の複素積分を考える。無限遠方における $\pm\infty \rightarrow \pm\infty + ib$ の積分 (C_2, C_4) は明らかにゼロ、また極がないので C の複素積分全体の値もゼロである。よって

$$\int_C dz e^{-az^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-az^2} + \int_{\infty+ib}^{-\infty+ib} dz e^{-az^2} = 0 \quad (13.14)$$

が得られる。これは $\int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-a(z-\beta)^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-az^2}$ を意味している。

なおここでの議論は、 a が実部が正の一般の複素数の場合にも拡張できる □

α の複素数への拡張の証明. β の複素数への拡張が一般の α で実行可能なので、ここでは $\beta = 0$ の場合を証明すれば十分である。 $\alpha = ae^{i\theta}$ ($-\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{\pi}{2}$) とする。ガウス積分の被積分関数は偶関数なので、求めたい結果を得るには

$$\int_0^{\infty} dx e^{-ae^{i\theta}x^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-i\theta/2} \quad (13.15)$$

が示せればよい。

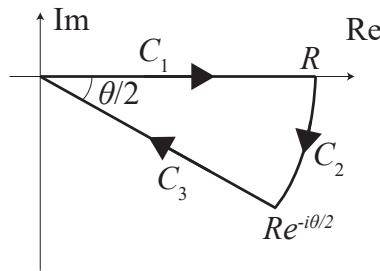


図 30: α の複素数への拡張の証明の際の複素積分の経路。

この積分を求めるため、図 30 のような積分経路での $e^{-ae^{i\theta}z^2}$ の複素積分を考える。ただし最終的に $R \rightarrow \infty$ の極限をとる。 C_1 の積分が求めたい積分である。 C_2 の積分は

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{-\theta/2} R d\phi \cdot e^{-ae^{i\theta}R^2e^{2i\phi}} \leq \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{-\theta/2} d\phi \cdot \left| Re^{-ae^{i\theta}R^2e^{2i\phi}} \right| = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{-\theta/2} d\phi \cdot Re^{-aR^2 \cos(\theta+2\phi)} = 0 \quad (13.16)$$

であり寄与を持たない¹⁸⁷。 C_3 の積分は、 $z = te^{-i\theta/2}$ と置換することで

$$\int_{C_3} dz e^{-ae^{i\theta}z^2} = \int_{\infty}^0 e^{-i\theta/2} dt e^{-at^2} = -e^{-i\theta/2} \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (13.17)$$

となる。積分経路 C に沿った全体の複素積分の値はゼロであることより、示したかった式 (13.15) を得る。 □

[13-2]. 以下の積分を求めよ

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{(-4i-3)x^2+(3i+2)x} \quad (13.18)$$

ちなみに、 α が純虚数の場合 ($|\theta| = \frac{\pi}{2}$ で実部がゼロの場合) にも同様の結果が成り立つ。これは、式 (13.16) の右から二番目の積分の被積分関数が

$$\int_0^{-\pi/4} d\phi Re^{-aR^2 \sin(-2\phi)} \leq \int_0^{-\pi/4} d\phi Re^{-aR^2(-4\phi)/\pi} = \frac{\pi R (1 - e^{-aR^2})}{4aR^2} \quad (13.19)$$

と上から評価でき、最後の項は $R \rightarrow \infty$ でゼロに収束することから確認できる。よって

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ix^2} = \sqrt{i\pi} \quad (13.20)$$

¹⁸⁷ $-\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{\pi}{2}$, $-\frac{\theta}{2} \leq \phi \leq 0$ なので、 $\cos(\theta+2\phi) > 0$ である点に注意。

が得られる。この実部と虚部をそれぞれ取り出したものを「フレネル積分」といい¹⁸⁸、光学の計算でよく用いられる。

定理 13.5 (フレネル積分 (Fresnel integrals)).

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \sin(x^2) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cos(x^2) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \quad (13.21)$$

13.3 ラプラス近似と鞍点法

ここでは、物理のあらゆるところで用いられる強力な近似手法である「ラプラスの方法」、あるいはその複素数版である「鞍点法」を見よう。

ラプラスの方法で計算するのは、以下のような形の積分である。

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) e^{-Nf(x)} \quad (13.22)$$

ただし $f(x)$ は滑らかな関数¹⁸⁹ で、その最小値はゼロとなるように原点を定めておく。特に N が非常に大きな状況を考える。

$f(x)$ が最小値ゼロをとる点はただ一カ所である状況を考える (最小値をとる点が複数個所ある場合には、それぞれの個所に対して以下の手続きを行う)。 $f(x)$ の最小点を x^* とする。 $x = x^*$ においては、被積分関数は $g(x^*)e^{-Nf(x^*)} = g(x^*)$ をとる。一方、 x が少しでも x^* から離れると、 N が大きい状況では $e^{-Nf(x)}$ は急激に小さくなる (図 31)。たとえ $f(x) = 0.01$ であっても、 $N = 10000$ であれば $e^{-Nf(x)} = e^{-100}$ と非常に小さい値となる。そのため、積分 I の値を決めるのは、 $x = x^*$ 近傍のみであり、そこから遠く離れた領域での挙動は N が大きい限り影響がないと考えられる。

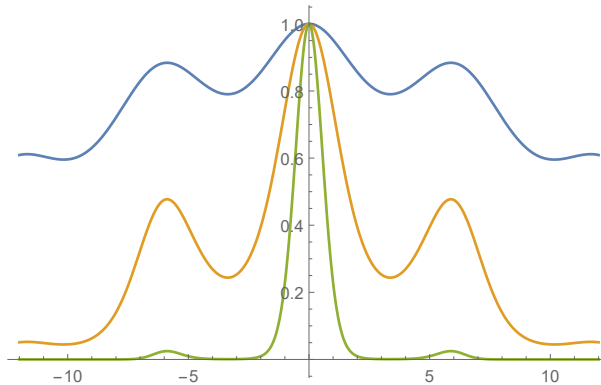


図 31: $f(x) = \frac{1}{300}x^2 + \frac{1}{10}(1 - \cos x)$ の下での $e^{-Nf(x)}$ の $N = 1, 6, 30$ (順に青、オレンジ、緑) のプロット。 N が大きくなるにつれ、 $f(x)$ の最小値 $x = 0$ が分布を支配することが見て取れる。

以上の洞察より、 $f(x)$ を $x = x^*$ 近傍で近似して計算することができると考えられる。テイラー展開により

$$f(x) \simeq \frac{f''(x^*)}{2}(x - x^*)^2 + O((x - x^*)^3) \quad (13.23)$$

と書けるので、積分 I は近似的に

$$I \simeq \int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2} \quad (13.24)$$

¹⁸⁸ フレネル積分といった場合には、積分範囲が $-\infty$ (あるいは 0) から ∞ ではなく、 0 から有限の値 y までとしたもの ($\int_0^y dx \sin(x^2)$ および $\int_0^y dx \cos(x^2)$) を指す場合もある。一般の y に対しては、この積分は初等関数の範囲で解けない。

¹⁸⁹ 今の我々の目的においては、 f は三階連続微分可能であるとする。

と評価できる。さらに指数関数の部分は $x \simeq x^*$ 以外の場所ではほとんどゼロとなり積分に寄与しないので、 $g(x)$ を $g(x^*)$ に置き換えても積分の値は変わらないと考えられる。これらの近似は、 $x \simeq x^*$ 以外の場所からの積分 I への寄与は無視できるので、 $x \simeq x^*$ ではない領域では元の積分の被積分関数を全然違う関数に取り換えてしまっても構わない（どのみち寄与ゼロなので）、という発想に基づいている。 $g(x)$ を $g(x^*)$ に置き換えると、これはガウス積分となるので計算できる。

$$I \simeq \int_{-\infty}^{\infty} dx g(x^*) e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2} = g(x^*) \sqrt{\frac{2\pi}{Nf''(x^*)}} \quad (13.25)$$

ここでの近似は、厳密に正当化することができる（詳細は 13.6 節の補論参照）。

定理 13.6 (ラプラスの方法 (Laplace's method)). $f(x)$ はただ一カ所 $x = x^*$ で最大値を持ち、 $x = x^*$ 近傍で三階連続微分可能な関数だとする。 $g(x)$ は $x = x^*$ 近傍で連続微分可能な任意の関数とする。このとき、左辺が十分大きな N で収束するとき、以下が成り立つ。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) e^{-Nf(x)} = g(x^*) e^{-Nf(x^*)} \sqrt{\frac{2\pi}{Nf''(x^*)}} \left(1 + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) \right) \quad (13.26)$$

[13-3]. N が大きい場合の $I = \int_0^{\infty} dx e^{-N \cdot x^x}$ を、 $I \simeq C e^{aN} / \sqrt{N}$ の形で近似的に評価せよ。補正項は特に考慮しなくてよい。

これを複素数の場合に拡張したのは「鞍点法」である¹⁹⁰。鞍点法では、ある複素経路 C に沿った複素積分

$$I = \int_C dz g(z) e^{-Nf(z)} \quad (13.27)$$

を考える。複素数の場合も基本的にはラプラスの方法と同じで、 $f(z)$ の実部が最小化される点 z^* の周りを考えればよい。

ただし、 z^* 近傍で $f(z)$ の虚部が変化すると、複素積分はうまく実行できなくなる。これは、

$$I = \int_C dz g(x) e^{-N\text{Re}f(z)} e^{-iN\text{Im}f(z)} \quad (13.28)$$

であり、 N が大きいときには、第一項が素早く減衰すると同時に、第二項 $e^{-iN\text{Im}f(z)}$ が素早く正負の間を振動してしまい、全体の積分の近似評価がうまく出来なくなってしまうためである。そのため、実部を最小化する点において、虚部が変化しない状況であってほしい。

幸いなことに、コーシーの積分定理により、極をまたがないのであれば積分経路 C の途中を変更しても複素積分の結果は変化しない。そのため、以下のように積分経路 C を変更する。なお以下では $f(z) = u(z) + iv(z)$ と実部と虚部を分解し、 $z = x + iy$ としている。

1. 実部が停留点となる点、つまり $u'(z) = 0$ となる点 z^{**} を通過する。
2. $u(z^{**})$ は経路 C 上における $u(z)$ の最小値である。
3. z^{**} 近傍の経路は、最も急速に $u(z)$ が大きくなる向き、つまり $\nabla u = \begin{pmatrix} \partial_x u \\ \partial_y u \end{pmatrix}$ に沿った向きである。

コーシー・リーマンの関係式より、解析関数 $f(z) = u(z) + iv(z)$ について $\partial_x u = \partial_y v$ 、 $\partial_y u = -\partial_x v$ である。そのため、 $\partial_x^2 u + \partial_y^2 u = 0$ が成り立ち¹⁹¹、 $u'(z) = 0$ ($\partial_x u = \partial_y u = 0$) が成り立つ停留点は鞍点であ

¹⁹⁰ 「鞍点近似」や「最急降下法 (method of steepest descent)」などとも呼ばれる。「鞍点法」の名前の由来は、コーシー・リーマンの関係式により、ある経路に沿って極小をとる点は、それと直交する向きの経路では極大となっており、全体としては鞍点になることによる。「最急降下法」は、積分経路がコーシーの積分定理によって変更できるので、最も急な減衰となる向きに積分経路を取り直すことから付いた名前である。

なお、実数のみの場合には極小点は特に鞍点ではないが、ラプラスの方法を「鞍点法」と呼ぶ場合もある。

¹⁹¹ なので u はラプラシアンがゼロの調和関数である。

る。また、 $\nabla u \cdot \nabla v = \partial_x u \partial_x v + \partial_y u \partial_y v = 0$ が成り立つので、 ∇u に沿った向きの変化で虚部 v は変化しない。なので、虚部の振動の問題を回避するには、最も急激に実部が変化する（= 近似精度がよくなる）向きに経路を選べばよいということが分かる。

なので、元の経路 C を、鞍点を ∇u の向きに通過するような経路 C' に自然に¹⁹² 変形して、その上での複素積分に対してラプラスの方法を用いることで、元々計算しなかった複素積分が計算できる。

13.4 ガンマ関数とスターリングの公式

この節では、階乗を一般化したものであるガンマ関数¹⁹³ を導入する。

定義 13.2 (ガンマ関数). ガンマ関数は以下で定義される。

$$\Gamma(z) := \int_0^{\infty} dt t^{z-1} e^{-t} \quad (13.29)$$

定理 13.7. z が自然数 n のとき、

$$\Gamma(n) = (n-1)! \quad (13.30)$$

が成り立つ。

証明. n に関する帰納法を用いて示す。

$n = 1$ のとき、

$$\Gamma(1) = \int_0^{\infty} dt e^{-t} = 1 = 0! \quad (13.31)$$

より成り立つ。

$n = k$ で式 (13.30) が成り立つと仮定する。このとき部分積分を用いて

$$\Gamma(k+1) = \int_0^{\infty} dt t^k e^{-t} = [-t^k e^{-t}]_{t=0}^{\infty} + \int_0^{\infty} dt k t^{k-1} e^{-t} = 0 + k \Gamma(k) = k! \quad (13.32)$$

となり、 $n = k+1$ でも式 (13.30) は成立する。よって示された。 \square

ガンマ関数に対してラプラスの方法を適用することにより、 n が大きい場合の階乗 $n!$ の近似公式であるスターリングの公式が得られる。まず階乗を

$$n! = \Gamma(n+1) = \int_0^{\infty} dt t^n e^{-t} = \int_0^{\infty} dt e^{n \ln t - t} = n e^{n \ln n} \int_0^{\infty} du e^{-n(u - \ln u)} \quad (13.33)$$

と変形する。ただし最後の等号では $u = \frac{t}{n}$ と変数変換した。 $f(u) = u - \ln u$ は $u^* = 1$ で最小値 1 をとる。 $u = 1$ での $f(u)$ の二階微分は $f''(1) = 1$ なので、右辺の積分はラプラスの方法を用いることで

$$\int_0^{\infty} du e^{-n(u - \ln u)} = e^{-n} \sqrt{\frac{2\pi}{n}} \left(1 + O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right) \right) \quad (13.34)$$

¹⁹² 「自然に」は厳密な言い方ではないが、大きく捻じ曲げたような経路を考えると、「鞍点の値 $u(z^*)$ が経路上の実部の最小値である」という条件 2 が成り立たなくなってしまう。

¹⁹³ 階乗の一般化関数 $F(z)$ そのものは色々考えることが出来るが、「正の実軸上で $\ln F(z)$ が下に凸」「 $F(0) = 1$ 」を満たすような複素正則関数への階乗の一般化はガンマ関数のみであることが証明されている（ボーア・モレルupp (Bohr-Mollerup) の定理）。

なお余談だが、「ボーア・モレルupp の定理」のボーアは、原子物理学者ニールス・ボーアの弟ハラルト・ボーア。彼は数学者にしてオリンピック種目サッカーのデンマーク代表（右サイドバック）として銀メダル（1908 年大会）を獲得している。余談の余談だが、ニールス・ボーアもサッカーがうまく、キーパーとしてデンマーク代表の補欠にまでなっていたが、残念ながら召集はされず、メダルはとれなかった。

と近似できる¹⁹⁴。以上により、階乗の近似式が得られる。

定理 13.8 (スターリングの公式 (Stirling's formula)). n の階乗は以下の近似式を満たす¹⁹⁵。

$$n! = \sqrt{2\pi n} e^{n \ln n - n} \left(1 + O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)\right) \quad (13.35)$$

スターリングの公式は、統計力学のエントロピーの計算などにおいて頻用される。例えば、 N 個の中から $M = O(N)$ 個を選ぶ場合の数¹⁹⁶ の対数は、 $O(N)$ の項までで

$$\begin{aligned} \ln \binom{N}{M} &= \ln \frac{N!}{M!(N-M)!} = N \ln N - N - (M \ln M - M + (N-M) \ln(N-M) - (N-M)) \\ &= M \ln \frac{N}{M} + (N-M) \ln \frac{N}{N-M} \end{aligned} \quad (13.36)$$

と評価できる。

13.5 ハバード・ストラトノビッチ変換

ラプラスの方法が直ちに使えない形の計算であっても、変形することでラプラスの方法が使えるように出来ることがある。その代表的な手法の一つである「ハバード・ストラトノビッチ変換」を見よう。ハバード・ストラトノビッチ変換は、指数の肩にある二次の項（そのままでは扱いづらい）に対し、ダミー変数を増やす代わりに項を一次にする技法である。我々の興味ある物理系の大半は相互作用する系だが、そうした相互作用する系に対する解析で、ハバード・ストラトノビッチ変換はよく用いられる。

抽象的な説明をするより具体例を見た方が分かりやすいと思うので、具体例で説明することにしよう。 N 個の ± 1 の状態をとるスピン S_1, \dots, S_N からなる系を考えよう。また、 N 個の p 次元ベクトル $\mathbf{X}^1, \dots, \mathbf{X}^N$ がある分布に従ってランダムに生成される¹⁹⁷。この古典スピン系のハミルトニアンを

$$H = -\frac{1}{2N} \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j \quad (13.37)$$

$$J_{ij} = \mathbf{X}^i \cdot \mathbf{X}^j \quad (13.38)$$

ととる¹⁹⁸。つまり、スピン間の相互作用 J_{ij} が与えられたベクトル \mathbf{X}^i と \mathbf{X}^j の内積で与えられる全結合スピン系だということである。もし \mathbf{X}^i たちがすべて同じベクトルならば、これは全結合イジング模型である。一般には \mathbf{X}^i たちは i ごとに異なる値をとっている。

この相互作用の形は「ヘブ則 (Hebb rule)」と呼ばれる。また、この形のハミルトニアンを持つ系は「ホップフィールド模型 (Hopfield model)」と呼ばれる。ヘブ則は、スピンを脳のニューロンに対応させた際のパターン記憶のモデル化¹⁹⁹ として知られており、ホップフィールド模型はニューロンにおける記憶の埋め込みの統計力学のシンプルなモデルとして議論されている。

我々は次の問題を考えたい。

¹⁹⁴ ランダウの O を用いたこの式は厳密に正しい式である。ただし多くの場合にはランダウの O は付けずに $\int_0^\infty du e^{-n(u-\ln u)} \simeq e^{-n} \sqrt{\frac{2\pi}{n}}$ と書く。これは近似式である。

¹⁹⁵ この誤差評価 $\left(1 + O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)\right)$ は緩い誤差評価で、実際には $\left(1 + O\left(\frac{1}{n}\right)\right)$ の近似精度があることが分かっている。

¹⁹⁶ 日本の学校では、場合の数は ${}_N C_M$ のように書く記法を教えるが、海外だと $\binom{N}{M}$ と書くことが多い。

¹⁹⁷ あるいは \mathbf{X}^i たちはパラメータとしてそれぞれ与えられているとしてもよい。本節後半の解析はこのような見方に立っている。

¹⁹⁸ 全体を 2 で割っているのは、同じ辺が ij と ji で二度出現するからである。

¹⁹⁹ ニューロンの記憶のモデルとして見る場合には、スピン i が上向き (下向き) であることを「 i 番目のニューロンが発火していた (していない)」とみなす。 k 番目のニューロンの発火パターンにおいて i 番目のニューロンが発火していたことを $X_i^k = 1$ 、発火していないことを $X_i^k = -1$ として記述する。そうすると、記憶するパターン数 p が小さい場合には、記憶された各パターンはこのハミルトニアンの固定点 (エネルギー極小点) になることが知られている。

問題：ハミルトニアンが式 (13.37)、相互作用 J_{ij} が式 (13.38) で与えられる系を考える。 \mathbf{X} の各ベクトル成分が確率 $1/2$ ずつで ± 1 をとるとする²⁰⁰。この設定の下で、 $N \rightarrow \infty$ の熱力学極限におけるホップフィールドモデルの分配関数

$$Z = \sum_{\mathbf{S}} e^{-\beta H} \quad (13.39)$$

を計算せよ。ただし $\sum_{\mathbf{S}}$ は $\sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1}$ の略記で、すべてのスピン配位に対する和を表している。

分配関数は本当は \mathbf{X}^i たちに依存した確率変数だが、中心極限定理によりほとんどすべての \mathbf{X}^i たちの出現に対し同一の分配関数になることが示せるので、以下ではこの「典型的な分配関数」を求める。分配関数が求まれば、ホップフィールドモデルの統計力学的な性質はそこから求めることができる。

この問題の最後の計算は煩雑になるのでその部分はこの講義ではフォローしないが、分配関数が必要ならば計算できるような形にまで変形できることを以下で示す²⁰¹。

分配関数は

$$Z = \sum_{\mathbf{S}} \exp \left[\frac{\beta}{2N} \sum_{k=1}^p \left(\sum_i X_k^i S_i \right)^2 \right] \quad (13.40)$$

と書き直せる。ここでラプラス近似を使うため、ハバード・ストラトノビッチ変換を行う。

定理 13.9 (ハバード・ストラトノビッチ変換²⁰² (Hubbard-Stratonovich transformation)). S の二次項の指数関数は、新たなダミー変数 m を導入し、以下のように書き直せる。

$$\exp \left[\frac{a}{2N} S^2 \right] = \sqrt{\frac{Na}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dm \exp \left[-\frac{Na}{2} m^2 + amS \right] \quad (13.41)$$

式 (13.41) が成り立つこと自体は、13.1 節で見たようにガウス積分の簡単な計算で分かるが、この変換によって指数の肩には S の一次の項しか現れていない点が注目すべき部分である。一次であれば項ごとに分解して計算を進めることが容易な場合が多い。実際、今回のホップフィールドモデルの場合もそうになっている。

今回の場合、 p 個の $\sum_i X_k^i S_i$ をそれぞれ式 (13.41) 中の S とみなし、それぞれに対応して p 個のダミー変数 m_1, \dots, m_p を導入する。すると分配関数は

$$\begin{aligned} Z &= \left(\frac{N\beta}{2\pi} \right)^{p/2} \sum_{\mathbf{S}} \int d\mathbf{m} \exp \left[-\frac{N\beta}{2} \sum_{k=1}^p m_k^2 + \beta \sum_{k=1}^p m_k \sum_i X_k^i S_i \right] \\ &= \left(\frac{N\beta}{2\pi} \right)^{p/2} \int d\mathbf{m} \exp \left[-\frac{N\beta}{2} \sum_{k=1}^p m_k^2 + \sum_i \ln \left[2 \cosh \left(\beta \sum_{k=1}^p m_k X_k^i \right) \right] \right] \end{aligned} \quad (13.42)$$

と計算できる。特に重要な点は、一行目の形になることによってスピン配位 \mathbf{S} に対する和が取れてしまった点である。これは S_i の項が指数の肩において一次になったので、スピン配位の和と積分を入れ替えて

$$\sum_{\mathbf{S}} \exp \left[\beta \sum_{k=1}^p m_k \sum_i X_k^i S_i \right] = \prod_{k=1}^p \left(\sum_{S_i=\pm 1} \exp \left[\beta m_k \sum_i X_k^i S_i \right] \right) = \prod_{k=1}^p \left(2 \cosh \left[\beta m_k \sum_i X_k^i \right] \right) \quad (13.43)$$

と計算出来たことによる。

²⁰⁰ このような確率変数を「ラデマッハ確率変数 (Rademacher random variable)」という。

²⁰¹ 今回示すのは最も簡単な場合である。(i) ベクトルの大きさ p (記憶する情報の種類に相当) が $O(N)$ の値をとる場合、(ii) $p = O(1)$ で N が有限の場合の有限サイズ効果の補正の評価、などはそれほどやさしくない。この辺りの物理的な議論は西森秀稔『スピングラスと情報統計力学』岩波書店、数学的に厳密な解析は A. Bovier, *Statistical Mechanics of Disordered Systems: A Mathematical Perspective*, Cambridge university press などの教科書を見ていただきたい。

²⁰² 「ストラトノビッチ・ハバード変換」と呼ばれることもある。

そうすると式 (13.42) の指数の肩はラプラス近似が適用できる形になっている。実際、

$$f(\mathbf{m}) = \frac{\beta}{2} \sum_{k=1}^p m_k^2 - \frac{1}{N} \sum_i \ln \left[2 \cosh \left(\beta \sum_{k=1}^p m_k X_k^i \right) \right] \quad (13.44)$$

と置けば、この積分は

$$Z = \left(\frac{N\beta}{2\pi} \right)^{p/2} \int d\mathbf{m} e^{-Nf(\mathbf{m})} \quad (13.45)$$

と、ラプラス近似そのものの形で書いている。ただし $\mathbf{m} := (m_1 \cdots m_p)^\top$ とベクトル表示した。 p 本ある m_1, \dots, m_p の極値に対する方程式は、 $f(\mathbf{m})$ をそれぞれ m_1, \dots, m_p で微分してゼロと置くことで得られる。その結果は、各 $k = 1, \dots, p$ に対する

$$m_k^* = \frac{1}{N} \sum_i X_k^i \tanh \left(\beta \sum_{k'=1}^p m_{k'}^* X_{k'}^i \right) \quad (13.46)$$

という極値方程式である。 $\mathbf{X}_i := (X_1^i \cdots X_p^i)^\top$ たちの経験分布（実際に得られた $\mathbf{X}^1, \dots, \mathbf{X}^N$ たちがなす分布）を $p(\mathbf{X})$ と書くことにしよう。 \mathbf{X} たちが独立同分布 $P(\mathbf{X})$ から確率的に生成されている場合、 $N \rightarrow \infty$ においては、経験分布 $p(\mathbf{X})$ はほとんど確実に $P(\mathbf{X})$ に一致する。確率分布 $p(\mathbf{X})$ に基づく期待値を $\mathbb{E}F(\mathbf{X}) := \sum_{\mathbf{X}} p(\mathbf{X}) F(\mathbf{X})$ と書くことにすると、式 (13.44) は

$$f(\mathbf{m}) = \frac{\beta}{2} |\mathbf{m}|^2 - \mathbb{E} \ln [2 \cosh(\beta \mathbf{m} \cdot \mathbf{X})] \quad (13.47)$$

と簡潔に書き直せる²⁰³。ここまでの議論は、 X_k^i たちがどのような値をとっているか、どのような分布をしているかには一切よらない一般的な議論である。

さて、 X_k^i が ± 1 を確率 $1/2$ ずつでとるという性質より

$$\mathbb{E}[(\mathbf{m} \cdot \mathbf{X})^2] = |\mathbf{m}|^2 \quad (13.48)$$

が成り立つ²⁰⁴。そのため、

$$\phi(x) := \frac{\beta}{2} x^2 - \ln[2 \cosh(\beta x)] \quad (13.49)$$

という関数を用いて

$$f(\mathbf{m}) = \mathbb{E}[\phi(\mathbf{m} \cdot \mathbf{X})] \quad (13.50)$$

と書ける。

$\phi(x)$ の最小値を与える x を x^* と書こう。これは

$$0 = \phi'(x) = \beta x - \beta \tanh \beta x \quad (13.51)$$

の解でもある²⁰⁵。一般の β に対してこの方程式を解いて解析的に x^* を求めることはできないが、解の個数や性質はグラフを図示することで導ける。特に十分低温（ β が十分大きい）ならば、 x^* は正負同じ絶対値で二つ現れる。

もし、 2^p 通りある \mathbf{X} すべてに対し、 $\mathbf{m} \cdot \mathbf{X} = \pm x^*$ となるような $\mathbf{m} = \mathbf{m}^*$ が存在したならば、その \mathbf{m}^* は明らかに $f(\mathbf{m})$ の最小値を与える。幸いなことに、そのような \mathbf{m}^* は存在する。それは「 p 個の成分のうち、1 か所だけ $\pm x^*$ 、他はすべてゼロ」というものである。全部で $2p$ 本あるこのようなベクトルたちが、 $f(\mathbf{m})$ の最小点である。また、これ以外に最小値を与える点が存在しないことも容易に確認できる。そのため、 Z を求めるにはこれら $2p$ 個の点の周りでラプラス近似を行ってすべて足しあげればよい。

²⁰³ とりうるすべての \mathbf{X}' について、 $p(\mathbf{X}') = (\mathbf{X}' \text{ の出現回数})/N$ なので、 $\frac{1}{N} \sum_i \ln [2 \cosh(\beta \sum_{k=1}^p m_k X_k^i)] = \mathbb{E} \ln [2 \cosh(\beta \mathbf{m} \cdot \mathbf{X})]$ である。 $2 \cosh(\beta \sum_{k=1}^p m_k X_k^i)$ は X_i ($1 \leq i \leq N$) の関数である点に注意する。

²⁰⁴ より一般に、 $\mathbb{E}[X_i^2] = 1$ 、 $\mathbb{E}[X_i X_j] = 0$ が任意の i, j で成り立つなら、以下の結果はそのまま成り立つ。

²⁰⁵ この形の方程式は、全結合イジング模型を解いた際にも出会ったはずである。

13.6 <補論>：ラプラスの方法の証明の概略

この節では、以下のラプラス近似 (13.26) を誤差項込みで導出する概略を示す²⁰⁶。まず導きたいラプラス近似 (13.26) の式を以下に再掲する。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) e^{-Nf(x)} = g(x^*) e^{-Nf(x^*)} \sqrt{\frac{2\pi}{Nf''(x^*)}} \left(1 + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) \right) \quad (13.26)$$

ラプラスの方法の仮定が本編ではやや曖昧だったので、ここで明確にしておこう。

- ある N_0 が存在し、 $N \geq N_0$ ならば $\int_{-\infty}^{\infty} dx |g(x)| e^{-Nf(x)}$ は有限の値に収束する。
- 任意の $d > 0$ に対し、 $\inf_{|x-x^*|>d} f(x) > f(x^*)$ が成り立つ。
- $f(x)$ は x^* 近傍で三階連続微分可能。
- $g(x)$ は x^* 近傍で連続微分可能。

ラプラスの方法の導出では、以下の手順で近似していく。ただし以下では d は十分小さく、また N は (d を決めたとうえで) 十分大きくとるものとする

1. $\int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) e^{-Nf(x)} \simeq \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx g(x) e^{-Nf(x)}$ (誤差は指数的に小さい)
2. $\int_{x^*-d}^{x^*+d} dx g(x) e^{-Nf(x)} \simeq e^{-Nf(x^*)} \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx g(x) e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2}$ (誤差は $O(1/\sqrt{N})$)
3. $e^{-Nf(x^*)} \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx g(x) e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2} \simeq e^{-Nf(x^*)} \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx g(x^*) e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2}$ (誤差は $O(1/\sqrt{N})$)
4. $e^{-Nf(x^*)} \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx g(x^*) e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2} \simeq e^{-Nf(x^*)} \int_{-\infty}^{\infty} dx g(x^*) e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2}$ (誤差は指数的に小さい)

以下順に証明の概略を示す。ただし 4 は単にガウス積分の積分範囲を有限領域に限定するだけで、この誤差評価は明らかなので省略する。

ステップ 1 : $f_d := \inf_{|x-x^*|>d} f(x)$ とする。すると 1 の近似誤差は

$$\left| \int_{|x-x^*|>d} dx g(x) e^{-Nf(x)} \right| \leq \int_{|x-x^*|>d} dx |g(x)| e^{-Nf(x)} \leq \left(\int_{|x-x^*|>d} dx |g(x)| e^{-N_0 f(x)} \right) e^{-(N-N_0)f_d} \quad (13.52)$$

と上から評価できる。ここで最右辺は $f_d > f(x^*)$ より、 $e^{-Nf(x^*)}$ よりも指数的に素早くゼロに収束する。

ステップ 2 : $x^* - d \leq x \leq x^* + d$ の区間において、 $f(x) = f(x^*) + \frac{1}{2} f''(x^*)(x-x^*)^2 + r(x)(x-x^*)^3$ と表す。このとき

$$\begin{aligned} \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx g(x) e^{-Nf(x)} &= e^{-Nf(x^*)} \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx g(x) e^{-\frac{N}{2} f''(x^*)(x-x^*)^2} e^{-Nr(x)(x-x^*)^3} \\ &= e^{-Nf(x^*)} \int_{-\sqrt{Nd}}^{\sqrt{Nd}} ds g(x) e^{-\frac{1}{2} f''(x^*) s^2} e^{-\frac{1}{\sqrt{N}} r(x) s^3} \end{aligned} \quad (13.53)$$

と書き直せる。ただし最後の等号では $s := \sqrt{N}(x-x^*)$ と変数変換した。積分のなかの $g(x)$ と $r(x)$ も本当は N 依存性を持つが、これはゆっくりとしか変動しないので変化の寄与は無視できる (厳密に押さえることも出来る)。なので N 依存性は実質的に最後の指数関数の肩にのみ現れているが、ここからの寄与は (積分を実行した下で) $e^{-\frac{1}{\sqrt{N}} r(x) s^3} = 1 + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$ と評価できる²⁰⁷。

²⁰⁶ 以下の内容は、若木宏文「ラプラス近似とその応用」数理解析研究所講究録 2019, 2133: 66-74 に基づく。

²⁰⁷ s は \sqrt{N} 程度まで大きくなるので、ナイーブに指数関数をテイラー展開しただけではこの評価は得られない。だが、 s が大きい領域ではかかっている $e^{-\frac{1}{2} f''(x^*) s^2}$ が指数的に小さくなるので、その点まで考慮して手前のガウス積分と組み合わせて評価することでこの結果が得られる。

ステップ 3 : $a := \sup_{|x-x^*|<d} |g'(x)|$ とする。すると 3 の近似誤差は

$$\begin{aligned} \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx (g(x) - g(x^*)) e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2} &\leq \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx a |x - x^*| e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2} \\ &= \frac{2a}{Nf''(x^*)} (1 - e^{-Nf''(x^*)d^2/2}) \end{aligned} \quad (13.54)$$

と評価できる。 $1/\sqrt{N}$ をくくりだすと、 $O(1/\sqrt{N})$ でゼロに収束することが分かる。

14 母関数の方法

14.1 母関数

定義 14.1 (母関数 (generating function)). 数列 $\{a_n\}_{n=1}$ に対し、この数列の「母関数」あるいは「生成関数」とは、以下のような関数を指す²⁰⁸。

$$f(t) := \sum_n a_n t^n, \quad g(t) := \sum_n \frac{a_n}{n!} t^n \quad (14.1)$$

どちらを用いるかは場合によるが、両者にはそんなに大きな違いはない。母関数を用いると、 m 番目の数列の値は

$$a_m = \frac{1}{m!} \left. \frac{d^m}{dt^m} f(t) \right|_{t=0} = \left. \frac{d^m}{dt^m} g(t) \right|_{t=0} \quad (14.2)$$

と簡単に求められる。

母関数は数列 a_n の情報をすべて持っているので、数列を求める代わりに母関数を求めてもよい。関数は微積分を実行したり代入して係数比較したりなど、離散的な数列よりも処理しやすいことも多い。この講義で扱うような確率計算以外にも、場合の数をカウントする組合せ論などでも幅広い応用がなされている組み合わせ論から具体例の一つ挙げよう²⁰⁹。

(問題)：自然数 n を「互いに異なる自然数たちの和で表す方法の場合の数 a_n 」と「正の奇数の和で表す方法の場合の数 b_n 」は一致することを示せ (オイラーの分割恒等式)。

証明. 前者の母関数は

$$f_a(x) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n x^n = \prod_{m=1}^{\infty} (1 + x^m) \quad (14.3)$$

である。一方、後者の母関数は

$$f_b(x) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} b_n x^n = \prod_{m=1}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^{\infty} x^{k(2m-1)} \right) = \prod_{m=1}^{\infty} \frac{1}{1 - x^{2m-1}} \quad (14.4)$$

である。両関数が一致することは

$$f_a(x) = \prod_{m=1}^{\infty} (1 + x^m) = \prod_{m=1}^{\infty} \frac{1 - x^{2m}}{1 - x^m} = \frac{\prod_{m=1}^{\infty} (1 - x^{2m})}{\prod_{m'=1}^{\infty} (1 - x^{m'})} = \prod_{m=1}^{\infty} \frac{1}{1 - x^{2m-1}} = f_b(x) \quad (14.5)$$

と確認できる²¹⁰。 □

特に指数型母関数で、 a_n としてキュムラント C_n を選んだものは「キュムラント母関数」あるいは「キュムラント生成関数」と呼ばれる。キュムラントの定義と比較することにより

$$g(t) = \ln \langle e^{Xt} \rangle \quad (14.6)$$

が成り立つ²¹¹。我々の関心が、熱力学極限をとるマクロ系の物理量や、長時間極限をとった確率過程における時間積算量など、 X がパラメータ N に対して比例して大きくなる量の $N \rightarrow \infty$ の挙動である場合は多

²⁰⁸ 呼び分けたいときは、 $f(t)$ を「通常型母関数」、 $g(t)$ を「指数型母関数」という。また、ほかのタイプの母関数が定義される場合もある。

²⁰⁹ ちなみに以下で紹介する証明法は、オイラー自身が分割恒等式を証明する際に用いたものである。

²¹⁰ 他の組合せ論における母関数の利用例は、例えばヴァン・リント、ウィルソン『組合せ論 上』(丸善出版) などで見れる。特にこの本では、母関数の方法以外の証明法が知られていない組み合わせ論の命題も紹介されている。

²¹¹ 指数の肩に虚数 i を付けた $\ln \langle e^{iXt} \rangle$ をキュムラント母関数と呼ぶこともある。対数の中身 $\langle e^{iXt} \rangle$ は「特性関数 (characteristic function)」と呼ばれるもので、これは確率密度関数のフーリエ変換なので確率論ではよく用いられる。

い。このときには、 $x := X/N$ に対する以下の「スケールされたキュムラント母関数」を議論することも多い。

定義 14.2 (スケールされたキュムラント母関数 (scaled cumulant generating function)). $x = X/N$ の「スケールされたキュムラント母関数」は以下で定義される。

$$q(k) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \langle e^{kX} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \langle e^{kNx} \rangle \quad (14.7)$$

X の分散は N に比例して増加し、 x の分散は $1/N$ の速さでゼロに収束する。非自明な分散の挙動を見たいならば、 X の分散なら N で割る、 x の分散なら N を掛ける必要がある。スケールされたキュムラント母関数の二階微分で得られる量は、ちょうど上記の処理を行って $O(1)$ にした分散であり、特別な処理なく x の分布の非自明な要素を拾い出せる。

14.2 計数場の方法

確率過程で定義される量のキュムラント母関数を計算する手法である「計数場 (counting field) の方法」を見よう。例えば、ある確率過程における「状態 β から状態 α への経験カレント (「 $\beta \rightarrow \alpha$ のジャンプの回数」 - 「 $\alpha \rightarrow \beta$ のジャンプの回数」) を確率変数 X とし、我々は長時間 ($N \rightarrow \infty$) の下での X のスケールされたキュムラント (N で割った分散など) を知りたいとしよう。この場合には、確率過程を与える確率行列 R と補助変数 k を用いて、以下のように「生成行列 (generator matrix)」 W を定義すると、キュムラントがうまく計算できる。

$$W_{ij} = \begin{cases} R_{ij}e^k & i = \alpha \text{ かつ } j = \beta, \\ R_{ij}e^{-k} & i = \beta \text{ かつ } j = \alpha, \\ R_{ij} & \text{その他} \end{cases} \quad (14.8)$$

ここで k は「計数場 (counting field)」と呼ばれ、 $\beta\alpha$ 間のジャンプの回数を数える役割を果たす。我々が測りたい物理量に依存して、 W の形は適切に定められる。

この確率過程における n ステップ目の状態を w^n 、全 N ステップにまたがる軌道を $\Gamma = w^0 \rightarrow w^1 \rightarrow w^2 \rightarrow \dots \rightarrow w^N$ と書くことにする。この軌道が観測される確率を $P(\Gamma)$ とすると、 $P(\Gamma)$ は

$$P(\Gamma) = R_{w^N w^{N-1}} R_{w^{N-1} w^{N-2}} \dots R_{w^2 w^1} R_{w^1 w^0} p_{w^0}^0. \quad (14.9)$$

で与えられる。 $n_{j \rightarrow i}(\Gamma)$ を軌道 Γ 中の状態 j から i へのジャンプの総数とすると、我々の関心の対象である $\beta\alpha$ 間の経験カレント J は $J(\Gamma) = n_{\beta \rightarrow \alpha}(\Gamma) - n_{\alpha \rightarrow \beta}(\Gamma)$ と書ける。式 (14.9) 右辺の R を W に置き換えた量を考えると、これは構成より

$$W_{w^N w^{N-1}} W_{w^{N-1} w^{N-2}} \dots W_{w^2 w^1} W_{w^1 w^0} p_{w^0}^0 = e^{kJ(\Gamma)} P(\Gamma), \quad (14.10)$$

を満たす。そのため横ベクトル $\mathbf{1} := (1 \ 1 \ \dots \ 1)$ を用いることで、キュムラント母関数の対数の中身 $\langle e^{kJ} \rangle$ を以下のように計算することができる。

$$\langle e^{kJ} \rangle = \sum_{\Gamma} e^{qJ(\Gamma)} P(\Gamma) = \mathbf{1} W^N \mathbf{p}^0. \quad (14.11)$$

さて、ペロン・フロベニウスの定理により、 W の最大実固有値 λ_0 は他の固有値の絶対値よりも真に大きい ($\lambda_0 > |\lambda_1| \geq \dots$)。よって、行列のべき乗の計算 (式 (2.38)) を思い出すことで、スケールされたキュ

ムラント母関数は

$$q(k) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \langle e^{kJ} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln(\mathbf{1}W^N\mathbf{p}^0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \sum_{i=0} a_i \lambda_i^N = \ln \lambda_0, \quad (14.12)$$

と W の最大固有値だけで書ける²¹²。ただしここで a_i は W と \mathbf{p}^0 には依存するが N にはよらない係数である²¹³。以上より、スケールされた X の n 次キュムラントは

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} C_n = \left. \frac{\partial^n}{\partial k^n} \ln \lambda_0 \right|_{k=0} \quad (14.13)$$

と計算することができる。

具体的問題の一つ考えてみよう。図 32 のような、山と谷を繰り返す周期ポテンシャル中のランダムウォークする粒子を考える。隣り合う山と谷の間の距離を 1 とする。粒子は右向きの外力を受けており、そのため平均すると左から右へと進む。山の上に粒子がいるときに、右及び左に進んで粒子が谷に落ちる確率を a と b 、谷底に粒子がいるときに、右及び左に進んで粒子が山に登る確率を c と d とする (図 32)。すると、この系は実質的に (山及び谷の) 二状態の確率過程とみなすことができる。以下、山にいる確率を p_1 、谷にいる確率を p_2 と書く。すると対応する確率行列は

$$R = \begin{pmatrix} 1 - a - b & c + d \\ a + b & 1 - c - d \end{pmatrix} \quad (14.14)$$

である。ただし、 a と b 、 c と d 、どちらで遷移したかに応じて右に進んだか左に進んだかが変わる点に注意しておく。

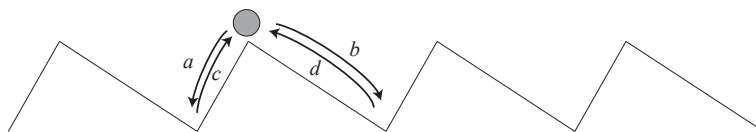


図 32: 山と谷を繰り返す周期ポテンシャル中のランダムウォーク。

問題: N ステップ後の、初期位置から見た右への移動距離を L とする。平均速度は $V = L/N$ である。 $N \rightarrow \infty$ における、速度 V の平均とスケールされた分散を求めよ。

平均速度 $\langle V \rangle$ は、定常分布が求まれば $\langle V \rangle = (b - a)p_1^{\text{ss}} + (c - d)p_2^{\text{ss}}$ と直接的に求められる (そして定常分布は $p_1^{\text{ss}} = (c + d)/(a + b + c + d)$ 、 $p_2^{\text{ss}} = (a + b)/(a + b + c + d)$ と簡単に解ける)。一方、スケールされた分散を求めるのは一筋縄ではいかない。分散を求めるには、スケールされたキュムラント母関数を用いるのが最も簡便である。

移動距離は、 b, c に沿って動くとき $+1$ 、 a, d に沿って動くとき -1 なので、生成行列 W は

$$W = \begin{pmatrix} 1 - a - b & ce^k + de^{-k} \\ ae^{-k} + be^k & 1 - c - d \end{pmatrix} \quad (14.15)$$

である。対応する固有値は

$$\lambda_{\pm} = 1 - \frac{a + b + c + d}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(a + b - c - d)^2 + 4(ae^{-k} + be^k)(ce^k + de^{-k})} \quad (14.16)$$

²¹² W が対角化できず一般化固有ベクトルを持つ場合が気になるかもしれないが、これは問題ない。なぜなら、ジョルダン標準形にすれば「対角行列+べき零行列」の形に出来るが、べき零行列は行列サイズ以上のべきがかかると消えてしまうので、ジョルダン標準形の無限べきは実質的に対角成分で支配されるからである。脚注 151 の議論も参照。

²¹³ $W = A^{-1} \text{diag}(\lambda_0, \lambda_1, \dots) A$ と対角化 (あるいはジョルダン標準化) がされるとすると、 $a_i = (\mathbf{1}A^{-1})_i (A\mathbf{p}^0)_i$ である。

である。よってスケールされたキュムラント母関数は

$$q(k) = \ln \lambda_+ = \ln \left(1 - \frac{a+b+c+d}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(a+b-c-d)^2 + 4(ae^{-k} + be^k)(ce^k + de^{-k})} \right) \quad (14.17)$$

と求まる。分散までの計算ならば、 k の 2 次までの展開で十分である。 k の 2 次まででこのルートの中身は

$$\begin{aligned} & \sqrt{(a+b-c-d)^2 + 4(ae^{-k} + be^k)(ce^k + de^{-k})} \\ & \simeq \sqrt{(a+b-c-d)^2 + 4 \left((a+b) \left(1 + \frac{k^2}{2} \right) + (b-a)k \right) \left((c+d) \left(1 + \frac{k^2}{2} \right) + (c-d)k \right)} \\ & = \sqrt{(a+b+c+d)^2 + 8(bc-ad)k + 4(bc+ad)k^2} \\ & \simeq (a+b+c+d) \left(1 + \frac{4(bc-ad)k + 2(bc+ad)k^2}{(a+b+c+d)^2} - 16 \left(\frac{(bc-ad)k}{(a+b+c+d)^2} \right)^2 \right) \end{aligned} \quad (14.18)$$

と計算できる。よって V の平均とスケールされた分散はそれぞれ

$$\langle V \rangle = \left. \frac{dq(k)}{dk} \right|_{k=0} = \frac{2(bc-ad)}{a+b+c+d} \quad (14.19)$$

$$N \langle V^2 \rangle = \left. \frac{d^2q(k)}{dk^2} \right|_{k=0} = \frac{2(bc+ad)}{a+b+c+d} - \frac{16(bc-ad)^2}{(a+b+c+d)^3} - \frac{4(bc-ad)^2}{(a+b+c+d)^2} \quad (14.20)$$

と求められる。

[14-1]. 同じランダムウォークの系で、ステップ終了時に山の上にいるステップ数を N_+ とする。山の上に粒子がいるステップ数の割合 $n := N_+/N$ に対するスケールされたキュムラント母関数を求めよ。

14.3 ルジャンドル変換

後の準備として、ある関数から別の関数を構成する手続きである「ルジャンドル変換」を見よう^{214 215}。

定義 14.3 (ルジャンドル変換 (Legendre transformation)). 関数 $f(x)$ に対するルジャンドル変換は、

$$g(a) := \sup_x [ax - f(x)] \quad (14.21)$$

で定義される²¹⁶。

特に $f(x)$ が下に狭義凸で微分可能な関数の場合、

$$g(a) = ax^* - f(x^*), \quad \text{ただし } x^* \text{ は } f'(x^*) = a \text{ の解} \quad (14.22)$$

とも書ける。

ルジャンドルの意味は図 33 を見るとわかりやすい。 $ax - f(x)$ は、 $y = ax$ と $y = f(x)$ との間の y 方向の距離を表している。 $f(x)$ が下に凸な場合、これが最大化されるのは $f(x)$ の傾きがちょうど a になる点である²¹⁷。

²¹⁴物理学者向けのルジャンドル変換の解説のある教科書としては、アーノルド『古典力学の数学的方法』岩波書店、田崎晴明『熱力学』『統計力学 II』培風館、清水明『熱力学の基礎』東京大学出版会などがある。

²¹⁵ルジャンドル変換については、5.3 節のヤングの不等式のところで少し (口頭で) 解説した。

²¹⁶文献や分野によっては -1 倍したものでルジャンドル変換を定義することもある。特に熱力学・統計力学では逆符号のルジャンドル変換が用いられることが多い。

²¹⁷厳密には、左右の微分を f'_\pm で書いたとき、 $f'_-(x) \leq x \leq f'_+(x)$ となるような x のことである。ただし x は複数ある可能性がある。

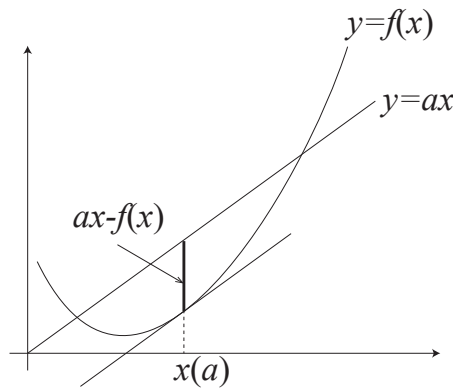


図 33: ルジャンドル変換のイメージ図。 $y = ax$ と $y = f(x)$ の間の距離（太線部）の最大値が $f(x)$ のルジャンドル変換 $g(a)$ である。

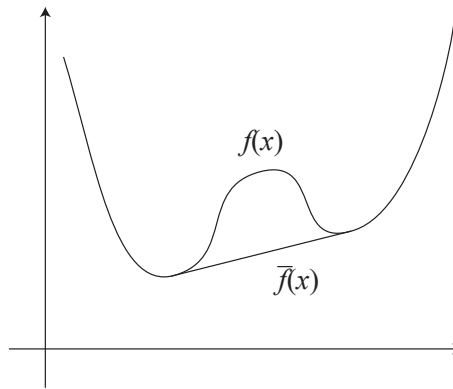


図 34: 非凸な関数 $f(x)$ に対するルジャンドル変換を考えた場合。 $f(x)$ の凸包 $\bar{f}(x)$ のルジャンドル変換と一致するので、凸法の内部の情報は失われる。

元の関数 $f(x)$ が下に凸でない場合、ルジャンドル変換して得られる関数 $g(a)$ は、 $f(x)$ の凸包をとった関数 $\bar{f}(x)$ に対するルジャンドル変換の結果と一致する（図 34）。要するに、 $f(x)$ の情報のうち凸包の内側に関するものは、ルジャンドル変換で失われてしまう。一方、元の $f(x)$ が下に凸な関数の場合、ルジャンドル変換して得られた関数 $g(a)$ に再びルジャンドル変換を施すと、再び同じ関数 $f(x)$ が得られる。

定理 14.1. $f(x)$ を下に凸な関数とする。このとき、 $f(x)$ のルジャンドル変換 $g(a)$ を再度ルジャンドル変換すると、 $f(x)$ が得られる。

$$f(x) = \sup_a [ax - g(a)] \quad (14.23)$$

証明. 解析的に示すことも出来る²¹⁸ が、ここでは直観的に分かりやすい図形的な証明を与える。定数項と原点を適宜動かすことで、 $f(0) = 0$ 、 $f'(0) = 0$ として一般性を失わない²¹⁹。

このとき、 $y = f'(x)$ のグラフを考える（図 35）。ただし微分できない点については、右微分と左微分の間の値を取りうるものとする。 f の凸性より、 f' は単調増大である。 $f(0) = 0$ なので、図 35 の薄い灰色の部分の面積が $f(x)$ である。

ルジャンドル変換で考える量 $ax - f(x)$ は、図 36 のように $y = a$ の線を引いた際の、長方形の部分から $y = f(x)$ の部分を取り去った領域の面積（濃いグレー）である。これが最大化されるのは、 $y = a$ と $y = f'(x)$ が交差するような x を選んだ場合で、このとき $g(a)$ は図 35 の濃いグレーの部分の面積に対応する。

²¹⁸ 解析的な証明を知りたい人は、例えば田崎晴明『熱力学』培風館などを見てほしい。

²¹⁹ $f'(x) = 0$ となる点が存在しない場合は、左微分が 0 より小さく、右微分が 0 より大きい点が $x = 0$ になるように選ぶものとする。

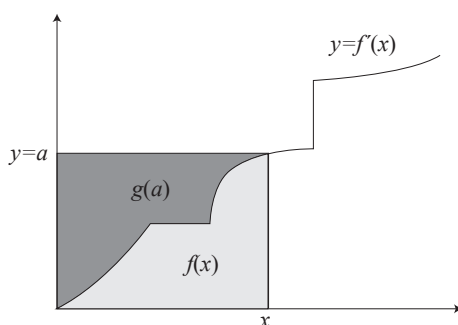


図 35: $y = f'(x)$ のグラフにおいて、薄いグレーの面積が $f(x)$ に、濃いグレーの面積が $g(a)$ に対応する。

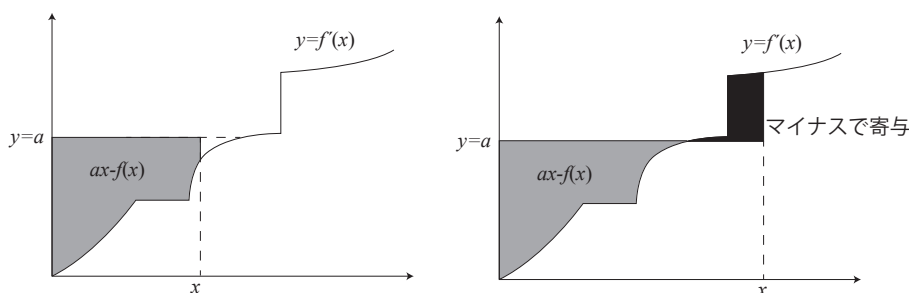


図 36: $ax - f(x)$ が最大化される x の探し方。 $y = a$ と $y = f(x)$ がちょうど交差するような x をとるときが最大となる。黒の面積はマイナスで $ax - f(x)$ に寄与する点に注意。

さてそうすると、 x 軸と y 軸を入れ替えると、きれいに $f(x)$ と $g(a)(= g(y))$ の役割が入れ替わることが分かる。これは、 $g(a)$ をルジャンドル変換すれば $f(x)$ に戻ることを意味している。□

[14-2]. $f(x) = -\ln x$ ($0 < x$) をルジャンドル変換せよ。

14.4 大偏差性質

物理や数学、情報科学においては、何らかのパラメータ N (システムサイズや時間、サンプル数などが N に選ばれることが多い) が発散する極限において、 N でスケールする量 X 、あるいは値が $O(1)$ になるように N で割ってスケールした量 $x := X/N$ 、の振る舞いを調べることが多い。例えば X が独立同分布からサンプルした量の経験平均である場合、 x は $N \rightarrow \infty$ の極限で分布の平均値に収束する。これが「大数の法則 (law of large numbers)」である。また、その分散は $1/N$ の速さでゼロに収束する。これが「中心極限定理 (central limit theorem)」である。これに対し「大偏差理論 (large deviation theory)」は、より中心から離れたところまで含めて、分布の振る舞いを見ようとする²²⁰。

パラメータが N のときの x の分布を $P_N(x)$ と書く。我々は特に、この分布が

$$P_N(x) \doteq e^{-NI(x)}, \quad (14.24)$$

という形をしている状態を考える。ただしここで上に点のついた等号「 \doteq 」は、両辺に $-\frac{1}{N} \ln$ を作用させて $N \rightarrow \infty$ 極限をとった際に、両辺が同じ値に収束することを意味している。 x の分布 P_N が式 (14.24) の形で書けると、この分布は「大偏差原理」を満たすという。

定義 14.4 (大偏差原理 (large deviation principle)). 確率分布 $P_N(x)$ について、「レート関数 (rate

²²⁰ この節の内容は、大偏差理論の物理学者向けのレビュー論文 H. Touchette, *The large deviation approach to statistical mechanics*, Phys. Rep. 478, 1 (2009) を参考にしている。

function)」または「大偏差関数 (large deviation function)」と呼ばれる関数 $I(x)$ が存在し

$$\lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{N} \ln P_N(x) = I(x) \quad (14.25)$$

を任意の x で満たすとき、この分布は大偏差原理を満たす (あるいは「大偏差性質 (large deviation property)」を持つ) という²²¹

レート関数とキュムラント母関数は、ルジャンドル変換を通じて結びつく。

定理 14.2 (ガートナー・エリスの定理 (Gärtner-Ellis theorem)). 式 (14.7) で定義される、確率変数密度 x に対するスケールされたキュムラント母関数 $q(k)$ が存在し、それが実数 $k \in \mathbb{R}$ 全域で微分可能とする。このとき、 x は大偏差原理を満たし、そのレート関数は以下のルジャンドル変換で与えられる。

$$I(x) = \sup_k [kx - q(k)]. \quad (14.27)$$

式 (14.27) に対する逆ルジャンドル変換を考えることにより、

$$q(k) = \sup_b [kb - I(b)]. \quad (14.28)$$

も得られる。

以下では、 x は大偏差原理を満たすことは仮定して、ガートナー・エリスの定理の後半部分の直観的な導出を与える²²²。 x の分布が大偏差型で $P(x) \doteq e^{-NI(x)}$ と書けているとすると、(スケールさせていない) キュムラント母関数 $\ln \langle e^{Nkx} \rangle$ は

$$\ln \langle e^{Nkx} \rangle = \ln \int e^{Nkx} P(x) dx = \ln \int e^{N(kx - I(x))} dx + o(N) \quad (14.29)$$

と変形できる。ここで、我々は最終的に $N \rightarrow \infty$ の極限をとるので、右辺に対してラプラス近似を用いて

$$\ln \int e^{N(kx - I(x))} dx \simeq \ln(C \cdot e^{N(kx^* - I(x^*))}). \quad (14.30)$$

と評価できる。ここで x^* は $kx - I(x)$ の最大点で、 C は x^* における $e^{N(kx - I(x))}$ の分布の幅である。一般に $C = O(N^{-1/2})$ である。よって

$$\ln \langle e^{Nkx} \rangle = \ln(C e^{N \sup_x [kx - I(x)]}) + o(N), \quad (14.31)$$

が得られるので、ここから欲しかった式 (14.28) が導ける。

$$q(k) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \langle e^{Nkx} \rangle = \sup_x [kx - I(x)] \quad (14.32)$$

一つの応用として、偏ったサイコロを振る問題を考えてみよう。

²²¹ 大偏差原理の数学的に厳密な定義は以下の通り。 S を実数の部分集合とし、 \bar{S} 及び S° を S の閉包及び内部とする。確率変数 x が集合 S に含まれる値をとる確率を $P(S)$ と書く。このとき、分布 $P_N(x)$ は大偏差原理を満たすとは、関数 $I(x)$ が存在し、任意のボレル加法族の可測集合 S について、

$$-\inf_{b \in S^\circ} I(x) \leq \liminf_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln P_N(S) \leq \limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln P_N(S) \leq -\inf_{b \in \bar{S}} I(x) \quad (14.26)$$

が成り立つことをいう。

²²² 数学的に厳密な定理の内容と証明を知りたい人は、Dembo and Zeitouni, *Large Deviations Techniques and Applications (Stochastic Modelling and Applied Probability)*, Springer などの教科書を見ていただきたい。

問題: $1, 2, \dots, m$ の目が確率 p_1, \dots, p_m が出るサイコロを N 回振り、出目の経験分布 q_1, \dots, q_m を測る。サイコロを多数回振れば、ほとんど確実に出目の経験分布 \mathbf{q} は各目の出現確率 \mathbf{p} に一致し、経験分布が出現確率と異なる確率は、 N の指数関数 e^{-aN} で減衰する。この指数減衰の速度 a を求めよ。

a はレート関数 $I(\mathbf{q})$ そのものなので、レート関数が求まればよい。直接計算でも求められるが、今回はガートナー・エリスの定理を利用することにしよう。補助変数は数ではなく m 次元ベクトル $\mathbf{k} = (k_1, \dots, k_m)^\top$ にとる。確率変数である経験分布 \mathbf{q} のスケールされたキュムラント母関数は

$$\eta(\mathbf{k}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \langle e^{N\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}} \rangle \quad (14.33)$$

である²²³。この右辺は ($N \rightarrow \infty$ 極限をとらなくても)

$$\frac{1}{N} \ln \langle e^{N\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}} \rangle = \frac{1}{N} \ln \left(\sum_{i=1}^m p_i e^{k_i} \right)^N = \ln \sum_i p_i e^{k_i} \quad (14.34)$$

と計算できる²²⁴。ここでガートナー・エリスの定理より

$$I(\mathbf{q}) = \sup_{\mathbf{k}} [\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} - \eta(\mathbf{k})] \quad (14.35)$$

が成り立つ。右辺の \sup を求めるには、各 k_i で微分すればよい。右辺を k_i で微分して 0 と置いて得られる極値方程式は

$$q_i - \frac{p_i e^{k_i}}{\sum_j p_j e^{k_j}} = 0 \quad (14.36)$$

なので、これを解いて

$$k_i = \ln \frac{q_i}{p_i} \quad (14.37)$$

が得られる。これを代入すると、

$$I(\mathbf{q}) = \sup_{\mathbf{k}} [\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} - \eta(\mathbf{k})] = \sum_i q_i \ln \frac{q_i}{p_i} \quad (14.38)$$

となる。この右辺は「相対エントロピー (relative entropy)」あるいは「カルバック・ライブラー情報量 (Kullback-Leibler divergence)」と呼ばれる量で、 $S(\mathbf{q}||\mathbf{p})$ と書く。

定理 14.3 (サノフの定理 (Sanov's theorem)). $1, \dots, m$ の目が確率 p_1, \dots, p_m が出るサイコロを N 回振った際の、出目の経験分布 q_1, \dots, q_m のレート関数 $I(\mathbf{q})$ は、 \mathbf{q} の \mathbf{p} に対する相対エントロピーに一致する。

$$I(\mathbf{q}) = S(\mathbf{q}||\mathbf{p}) \quad (14.39)$$

ちなみに大偏差性質やスケールされたキュムラント母関数は、実は平衡統計力学で既に見たことのあるものである。マクロな系の統計力学を考え、 $\langle \cdot \rangle$ は (エネルギーが異なるものも含む) 全状態が等しい確率で出現するような確率分布としよう。系のサイズを N とし、系の状態のエネルギー密度 e に対して

$$q(k) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \langle e^{Nke} \rangle \quad (14.40)$$

というスケールされたキュムラント母関数を考えると、これは

$$q(k) = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{N} (\ln Z_N(k) - \ln \Omega_N) \quad (14.41)$$

²²³ 経験分布 \mathbf{q} との混同を避けるため、キュムラント母関数を η と置いた。

²²⁴ ある一つの目における $N\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}$ は、「その目において i をとった回数 $\times k_i$ 」の i についての和である。

となり、(k によらない) 全状態数 Ω_N の寄与を除くと、分配関数 Z_N そのもので書ける。ここで k は逆温度を -1 倍したもの ($k = -\beta$) の役割を果たしている。つまり、自由エネルギー密度に逆温度を掛けたもの βf はキュムラント母関数と見ることができる。

エネルギー密度 e での状態数 $W(e) = e^{Ns(e)}$ を用いると、全状態が等確率で出現する分布の下でのエネルギー密度 e の出現確率は

$$P(e) = \frac{W(e)}{\Omega_N} = e^{Ns(e) - \ln \Omega_N} \quad (14.42)$$

と書ける。これは、エネルギー分布 $P(e) \doteq e^{-NI(e)}$ のレート関数が $I(e) = s(e) - \frac{1}{N} \ln \Omega_N$ と書けることを意味している。さて、熱力学により、エントロピー密度 $s(e)$ の e によるルジャンドル変換は $\beta f(\beta)$ である²²⁵。この事実は、キュムラント母関数 $q(k)$ とレート関数 $I(e)$ がルジャンドル変換で結びつくということであり、これはガートナー・エリスの定理そのものである。つまり、ガートナー・エリスの定理の特殊な場合は、熱統計力学の熱力学関数のルジャンドル変換として既に学んでいたということである。

²²⁵エントロピー $S(U)$ の U についてのルジャンドル変換が $\beta F(\beta)$ になることに対応している。熱力学でよく見るルジャンドル変換は、 $U(S)$ の S についてのルジャンドル変換が $F(T)$ になる、というものであり、本質は両者同じだが見た目が少し違う点に注意。

15 ダイバージェンスと仮説検定

この章では²²⁶いくつかのダイバージェンス（相対エントロピーの一般化）を導入する。併せて、仮説検定という情報科学・数理統計学のスタンダードな議論枠組といくつかの結果を紹介する。一見すると仮説検定は物理とは全く関係のない問題設定に見えるが、実は物理の問題と密接に結びつくことを最後に見る。

15.1 エントロピーとダイバージェンス

前の章では、二つの確率分布の（擬）距離を与える量として相対エントロピーを導入した。ここでは、相対エントロピーを特殊な場合を含む、より一般的な（擬）距離を導入する。

定義 15.1 (f -ダイバージェンス). $f(x)$ を下に凸な関数とする。確率分布 \mathbf{p}, \mathbf{q} に対し、 f -ダイバージェンス (f -divergence) を

$$D_f(\mathbf{p}||\mathbf{q}) := \sum_i q_i f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \quad (15.1)$$

で定義する。

$f(x) = x \ln x$ と取ると、 $D_f(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = S(\mathbf{p}||\mathbf{q})$ と相対エントロピーが得られる。また、 $f(x) = -\ln x$ と取ると、 $D_f(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = S(\mathbf{q}||\mathbf{p})$ と引数を入れ替えた相対エントロピーが得られる。そのため、 f -ダイバージェンスは相対エントロピーを特殊な場合を含んでいる。

特に重要な場合として、 $f(x) = x^\alpha$ の場合が挙げられる。これを少し変形したものがレニー α -ダイバージェンスである。レニー α -ダイバージェンスは情報理論などでよく用いられる。

定義 15.2 (レニー α -ダイバージェンス). $f(x) = x^\alpha$ ($0 \leq \alpha \leq \infty$) と選んだ際の

$$S_\alpha(\mathbf{p}||\mathbf{q}) := \frac{1}{\alpha-1} \ln D_f(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = \frac{1}{\alpha-1} \ln \left(\sum_i \frac{p_i^\alpha}{q_i^{\alpha-1}} \right) \quad (15.2)$$

を「レニー α -ダイバージェンス (Rényi α -divergence)」と呼ぶ²²⁷。

[15-1]. $\alpha \rightarrow 1$ の極限を取ると、レニー α -ダイバージェンスは相対エントロピーになることを示せ。

$\alpha \rightarrow 0$ を取ると、 p_i^α は $p_i > 0$ ならば 1、 $p_i = 0$ ならば 0 となるので、レニー 0-ダイバージェンスは

$$S_0(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = -\ln \left(\sum_{i:p_i>0} q_i \right) \quad (15.3)$$

と書ける。また、 $\alpha \rightarrow \infty$ をとると、

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \left(\sum_i \frac{p_i^\alpha}{q_i^{\alpha-1}} \right)^{1/(\alpha-1)} = \max_i \frac{p_i}{q_i} \quad (15.4)$$

²²⁶この章の内容は、T. Sagawa, "Entropy, Divergence, and Majorization in Classical and Quantum Thermodynamics", Springer を参照した。

²²⁷ $\alpha = 0, 1, \infty$ については極限で定義を与える。

$\alpha \geq 1$ でないと $f(x)$ は下に凸にならないが、ここでは形式的に $0 \leq \alpha < 1$ でもこのように定義を与える。より正確には、 $0 \leq \alpha < 1$ では $f(x) = -x^\alpha$ ととり、レニー α -ダイバージェンスの定義を $\frac{1}{\alpha-1} \ln(-D_f(\mathbf{p}||\mathbf{q}))$ とすればよい (かかっている $\frac{1}{\alpha-1}$ が負である点に注意)。

となるため、レニー ∞ -ダイバージェンスは

$$S_\infty(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = \ln \left(\max_i \frac{p_i}{q_i} \right) \quad (15.5)$$

と書ける。

ここで導入したダイバージェンスが、分布のずれの指標として望ましい性質を持っていることを確認しよう。まず、ずれ（擬距離）は二つの分布が一致しているときに最小値ゼロを取り、その他の場合にはゼロ以上の値を取ってほしい²²⁸。この性質は実際に成り立つ。

定理 15.1. $f(x)$ は $f(1) = 0$ を満たすとする。このとき、 f -ダイバージェンスは非負である。すなわち

$$D_f(\mathbf{p}||\mathbf{q}) \geq 0 \quad (15.6)$$

証明. $f(x)$ は下に凸かつ $f(1) = 0$ なので、ある k が存在し、 $f(x) \geq k(x - 1)$ が任意の x で成り立つように出来る²²⁹。よって

$$D_f(\mathbf{p}||\mathbf{q}) := \sum_i q_i f \left(\frac{p_i}{q_i} \right) \geq \sum_i q_i k \left(\frac{p_i}{q_i} - 1 \right) = \sum_i k(p_i - q_i) = 0 \quad (15.7)$$

となり、欲しかった結果が得られる。 □

定理 15.2. レニー α -ダイバージェンス ($0 \leq \alpha \leq \infty$) は非負である。すなわち

$$S_\alpha(\mathbf{p}||\mathbf{q}) \geq 0 \quad (15.8)$$

証明. $\alpha > 1$ の場合、 $f(x) = x^\alpha - 1$ と置くと、定理 15.1 より $S_\alpha(\mathbf{p}||\mathbf{q})$ の対数の中身 $D_f(\mathbf{p}||\mathbf{q}) + 1$ が 1 以上であることが示される²³⁰ ため、 $S_\alpha(\mathbf{p}||\mathbf{q}) \geq 0$ が得られる。

$\alpha < 1$ の場合、 $f(x) = 1 - x^\alpha$ と置くと、定理 15.1 より $S_\alpha(\mathbf{p}||\mathbf{q})$ の対数の中身 $-D_f(\mathbf{p}||\mathbf{q}) + 1$ が 1 以下であることが示されるため、 $S_\alpha(\mathbf{p}||\mathbf{q}) \geq 0$ が得られる。

$\alpha = 1$ の場合は、 $f(x) = x \ln x$ の場合の f -ダイバージェンスであり、これは定理 15.1 より非負である。 □

また、二つの分布の間のずれは、マルコフ過程で時間発展するとともに小さくなってほしい。この性質は「単調性 (monotonicity)」と呼ばれる。d-majorization に関する定理 7.6 の $4 \Rightarrow 3$ で、 f -ダイバージェンスの単調性はすでに示されている。結果を f -ダイバージェンスの言葉を用いて再掲しておく。

定理 15.3. T を確率行列、 $\mathbf{p}' = T\mathbf{p}$ 、 $\mathbf{q}' = T\mathbf{q}$ とする。このとき、 f -ダイバージェンスは

$$D_f(\mathbf{p}'||\mathbf{q}') \leq D_f(\mathbf{p}||\mathbf{q}) \quad (15.9)$$

を満たす。

²²⁸ 本当は「二つの分布が一致していないならば、必ずゼロより大きい値を取る」であってほしい。これは f が狭義凸であれば満たされる。

²²⁹ f が滑らかなら、 $x = 1$ における $f(x)$ の接線が $y = k(x - 1)$ の役割を果たす。

²³⁰ この場合、 $D_f(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = \sum_i q_i \left(\left(\frac{p_i}{q_i} \right)^\alpha - 1 \right) = \sum_i \frac{p_i^\alpha}{q_i^{\alpha-1}} - 1$ が 0 以上であることが示される。

また、レニー α -ダイバージェンスもまた単調性を満たす。これは、 $\alpha > 1$ の場合には、 $S_\alpha(\mathbf{p}||\mathbf{q})$ の対数の中身は $D_f(\mathbf{p}||\mathbf{q}) + 1$ ($f(x) = x^\alpha - 1$ と置く)、 $\alpha < 1$ の場合には、 $S_\alpha(\mathbf{p}||\mathbf{q})$ の対数の中身は $-D_f(\mathbf{p}||\mathbf{q}) + 1$ ($f(x) = 1 - x^\alpha$ と置く) であること²³¹ から直ちに従う。

定理 15.4. T を確率行列、 $\mathbf{p}' = T\mathbf{p}$ 、 $\mathbf{q}' = T\mathbf{q}$ とする。このとき、レニー α -ダイバージェンスは

$$S_\alpha(\mathbf{p}'||\mathbf{q}') \leq S_\alpha(\mathbf{p}||\mathbf{q}) \quad (15.10)$$

を満たす。

特に $f(x)$ が狭義凸関数 ($0 < \alpha < \infty$) ならば、定理 7.6 の $4 \Rightarrow 3$ の等号達成条件 (Jensen の不等式の等号達成) を考えることにより、この単調性の不等式が等号達成するのは、 $\mathbf{p} = \mathbf{q}$ である場合²³²、あるいは確率行列 T が置換行列である場合であることがわかる。

レニー α -ダイバージェンスにおいて特に \mathbf{q} を一様分布にとる状況を考えよう。とりうる状態が d 通りあるならば、このときのレニー α -ダイバージェンスは

$$S_\alpha(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = \frac{1}{\alpha - 1} \ln \sum_i p_i^\alpha + \ln d \quad (15.11)$$

となる。特に右辺第一項はゼロ以下である。そこで、以下のように右辺第一項を -1 倍した量としてレニー α -エントロピーを定義する。

定義 15.3 (レニー α -エントロピー). \mathbf{p} に対する「レニー α -エントロピー (Rényi α -entropy)」を

$$S_\alpha(\mathbf{p}) := -\frac{1}{\alpha - 1} \ln \sum_i p_i^\alpha \quad (15.12)$$

で定義する。

この $\alpha \rightarrow 1$ 極限は、よく知られたシャノンエントロピーである。シャノンエントロピーは、分布のばらつき具合を定量化した量で、物理でも情報理論でもいたるところに顔を出す極めて重要な量である。

定義 15.4 (シャノンエントロピー). \mathbf{p} に対する「シャノンエントロピー (Shannon entropy)」を

$$S(\mathbf{p}) = -\sum_i p_i \ln p_i \quad (15.13)$$

で定義する。

15.2 仮説検定

ここでは、情報理論、特に数理統計学で重要な問題である「仮説検定 (hypothesis testing)」の問題を考えよう。一見すると、これは物理とは何の関係もない、純粋な統計学の問題であるように見えると思うが、実は意外な形で物理の問題とつながっている。このつながりは次の節で明らかにする。

仮説検定では以下のような問題を考える。

²³¹ 後者の場合、対数の外にかかっている係数が負である点に注意。

²³² すべての k で $p_k/q_k = \text{const}$ が成り立つ状況が $\mathbf{p} = \mathbf{q}$ に相当する。

問題：確率分布 p または q (どちらか一方に固定されている) に従って、 d 種類の状態が確率的に生成されている状況を考える。与えられた状態たちは、どちらの確率分布から生成されたものかを当てよ。

現実的な統計学が直面する設定では、可能性が二種類に絞られていることは通常ないが、ここでは数学的な問題設定あるいは理想化された設定として、このような問題を考える。特に我々の主眼「 q か否か」の検証だとすると、「生成確率分布は q である」が「対立仮説 (alternative hypothesis)」、「生成確率分布は p である」が「帰無仮説 (null hypothesis)」である。念頭に置いている状況は「デフォルトでは帰無仮説の側を真とみなしており、特別な証拠が生じた場合に初めて帰無仮説を棄却する (対立仮説に乗り換える)」というものである。現実的な統計学の問題状況は、例えば「新しい育成法 A を用いることで、稲の収量が既存の方法の 1.2 倍に増える」という仮説 (対立仮説) を検証したい、といった状況である。この場合には、「新しい育成法 A を用いた場合の稲の収量は、既存の方法と同じである」が帰無仮説となる²³³。

この場合、我々は二種類の誤りを犯しうる。一つ目は「本当は帰無仮説が真なのに、誤って帰無仮説を棄却してしまうこと」であり、これは「第一種過誤 (Type I error)」あるいは「擬陽性 (false positive)」と呼ばれる。二つ目は「本当は対立仮説が真 (帰無仮説が偽) なのに、誤って帰無仮説を維持してしまうこと」であり、これは「第二種過誤 (Type II error)」あるいは「偽陰性 (false negative)」と呼ばれる。この二つは数学的には対称だが、日常的問題設定では対称ではない場合も多い (「危険な製品を誤って安全だと誤認して新規販売する」のは「安全な製品を誤って危険だと誤認して販売に出すのを取りやめる」よりはるかに悪い)。

この二つはトレードオフの関係にあり、対立仮説を採用しやすくすれば第一種過誤が、帰無仮説を維持しやすくすれば第二種過誤が生じやすくなる。では第一種過誤の大きさを一定値以下にするという制限の下で、どこまで第二種過誤は下げられるだろうか。最小の第二種過誤の確率を実現するプロトコルはどのようなものだろうか。それを示すのが、「ネイマン・ピアソンの補題」である

定理 15.5 (ネイマン・ピアソンの補題 (Neyman–Pearson lemma)). 第一種過誤の確率を一定値 α 以下に保ったまま、第二種過誤の確率 β を最小化する決定論的プロトコル²³⁴は、得られた状態が集合

$$S(k) := \left\{ i \mid \frac{p_i}{q_i} \geq k \right\} \quad (15.14)$$

に入っていれば p 、入っていなければ q と推定する、という形のプロトコルである。(k の値は望む第一種過誤の確率 α によって定まる)

[15-2]. 与えられた α に対し、 k を定める手続きを述べよ。

この結果が成り立つ理由は、より一般化した以下の定理を見ることで明らかとなる。

定理 15.6. 第一種過誤の確率を一定値 α 以下に保ったまま、確率的プロトコルで達成可能な第二種過誤の確率 β の最小値は、 (p, q) に対するローレンツカーブの $y = 1 - \alpha$ における x の値である。

この定理は、図 37 より明らかであろう。青と赤の割り振りを変えると、対応するカーブはローレンツカーブの下を通るカーブとなり、そのカーブと $y = 1 - \alpha$ との交点 (そのプロトコルでの第二種過誤の確率) は β^* よりも大きくなる側に動く。

ちなみに心理学などでしばしば見る「 p 値」は、行った実験において「帰無仮説が真である場合に、観測された値よりも極端な値が観測される確率」のことである。 p 値が「要求されていた第一種過誤の値 (多くの場合に 0.05)」を下回っている場合に、帰無仮説が棄却され対立仮説が採用される²³⁵。

²³³他の可能性も無数に存在する (1.1 倍増える、1.5 倍増える、0.8 倍に減る、など) が、この二つに絞りで検定は行われる。

²³⁴これと対比される確率的プロトコルは、「ある状態が出現したら、確率 a ($0 < a < 1$) で p と、確率 $1 - a$ で q と推定する」というタイプの推定を許すプロトコルである。

²³⁵では第二種過誤についてはどう評価されているのか、というのが自然な疑問だと思うが、実は p 値を用いた研究では、第二種過誤はコントロールされていない場合が多い (第二種過誤が 0.5 という実験もあるという)。仮説検定の正しい意味付けや使い方、こうした実際の現場における仮説検定の問題点などは、ゾルタン・ディエネス『科学としての心理学—科学的・統計的推測入門』新曜社が詳しい。

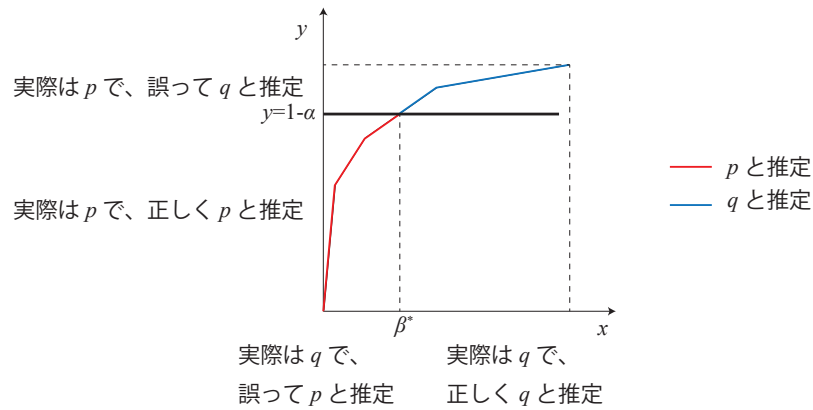


図 37: ローレンツカーブと仮説検定の二つの過誤の確率の関係。赤線に対応する状態に対しては p 、青線に対応する状態に対しては q と推定する（線の途中までの場合は確率的な推定を行う）。第一種過誤の確率を一定値 α 以下に保った状況での、第二種過誤の確率の最小値 β^* は、 $y = 1 - \alpha$ とローレンツカーブの交点の x 座標である。

さて、特に「 p または q に従う状態の生成源から、 n 個の状態を得られる」という状況を考えよう。得られた状態たちは「独立同分布 (independent and identically distributed : i.i.d. とよく省略される)」に従う。 n を増加させていけば、どちらが生成源かはより判別しやすくなる。ここでは特に、第一種過誤の確率を一定値以下に固定した下で、 n を増やした際にどのように第二種過誤の確率が減っていくのかを考えよう²³⁶。これを議論するために、以下の「仮説検定ダイバージェンス」を導入する。

定義 15.5 (仮説検定ダイバージェンス). $0 < \eta < 1$ に対し、「仮説検定ダイバージェンス (hypothesis testing divergence)」を以下で定義する。

$$S_H^\eta(\mathbf{p}||\mathbf{q}) := -\ln \left(\frac{1}{\eta} \min_{\substack{0 \leq s_i \leq 1, \\ \sum_i s_i p_i \geq \eta}} \sum_i s_i q_i \right) \quad (15.15)$$

カッコ内の最小化された量 ($1/\eta$ がかかっていないもの) は頻出するので、これを

$$M^\eta(\mathbf{p}||\mathbf{q}) := \min_{\substack{0 \leq s_i \leq 1, \\ \sum_i s_i p_i \geq \eta}} \sum_i s_i q_i \quad (15.16)$$

と書くことにする。

s_i は「状態 i が観測されたときに、『 p である』と推定する確率」を表している。決定論的なプロトコルであれば、 s_i は 0 または 1 のどちらかの値を取る。拘束条件 $\sum_i s_i p_i \geq \eta$ は「実際の分布が p のときに、『 p である』と推定する確率は η 以上 (本当は p なのに誤って『 q である』と推定する第一種過誤を犯す確率は $1 - \eta$ 未満)」という制限を表している。最小化する対象の $\sum_i s_i q_i$ は、「実際の分布が q のときに、誤って『 p である』と推定する確率 (第二種過誤)」を表している。そのため、 $M^\eta(\mathbf{p}||\mathbf{q})$ は「第一種過誤の確率を $1 - \eta$ に抑える条件の下での、第二種過誤の確率の最小値」である (仮説検定ダイバージェンスは、これを η で割って $-\ln$ をとったものである)。定義から明らかなように、 $\eta \leq \eta'$ ならば $S_H^\eta(\mathbf{p}||\mathbf{q}) \geq S_H^{\eta'}(\mathbf{p}||\mathbf{q})$ である。

n 状態に対する仮説検定を行うと、第一種過誤の確率 η を固定している状況では、第二種過誤の確率は n に対して指数的に減衰する。言い換えると、 $S_H^\eta(\mathbf{p}^{\otimes n}||\mathbf{q}^{\otimes n})$ は n に比例して増加していく。そのため、分布

²³⁶ この設定では、統計学的意味は先ほどと逆になっている点に注意しておく。すなわち、第一種過誤は小さい定数なのに対し、第二種過誤は指数的にゼロに近づいていく

の特徴を表す量は、仮説検定ダイバージェンスレート $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} S_H^\eta(\mathbf{p}^{\otimes n} \| \mathbf{q}^{\otimes n})$ である。これは「第二種過誤の指数減衰の n の係数」である²³⁷。この量について、以下の強力な定理が知られている²³⁸。

定理 15.7 (スタインの補題 (Stein's lemma)). 任意の $0 < \eta < 1$ について、仮説検定ダイバージェンスレートは相対エントロピーに収束する。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} S_H^\eta(\mathbf{p}^{\otimes n} \| \mathbf{q}^{\otimes n}) = S_1(\mathbf{p} \| \mathbf{q}) \quad (15.17)$$

色々な証明方法が知られている。標準的な証明方法は典型集合を用いる²³⁹ものだが、ここではローレンツカーブを用いることによる簡潔な証明を与える。

証明. まず、生成された n 状態の列 $I = (i_1, i_2, \dots, i_n)$ についての確率変数

$$X_I = \frac{1}{n} \ln \frac{p_I}{q_I} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \ln \frac{p_{i_k}}{q_{i_k}} \quad (15.18)$$

は、確率 \mathbf{p} で状態が生成されている状況では

$$\langle X_I \rangle = \left\langle \ln \frac{p_i}{q_i} \right\rangle_{\mathbf{p}} = S_1(\mathbf{p} \| \mathbf{q}) \quad (15.19)$$

に確率収束することに着目する。ただし p_I は、状態の生成確率が \mathbf{p} の下で列 I が生成される確率を表す。言い換えると、確率 \mathbf{p} で状態生成して得られた列 I に対し、 n を十分大きくすれば、いくらでも 1 に近い確率で、 $\frac{1}{n} \ln \frac{p_I}{q_I}$ の値はいくらでも $S_1(\mathbf{p} \| \mathbf{q})$ に近づく。よって、任意の $\varepsilon > 0$ に対し、列の集合の部分集合 S_ε として、

$$S_\varepsilon := \left\{ I \mid \left| \frac{1}{n} \ln \frac{p_I}{q_I} - S_1(\mathbf{p} \| \mathbf{q}) \right| < \varepsilon \right\} \quad (15.20)$$

というものを考えると、任意の $\delta > 0$ に対し十分大きい n が存在して

$$p(S_\varepsilon) > 1 - \delta \quad (15.21)$$

が成り立つ。

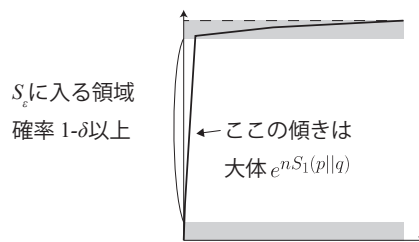


図 38: $(\mathbf{p}^{\otimes n}, \mathbf{q}^{\otimes n})$ のローレンツカーブ。 δ は好きなだけ小さくできるので、ほとんどすべての y の値において、ローレンツカーブの傾きは $e^{n S_1(\mathbf{p} \| \mathbf{q})}$ である。

さて、 $(\mathbf{p}^{\otimes n}, \mathbf{q}^{\otimes n})$ のローレンツカーブを考えると、図 38 のように、ほとんど y 軸及び $y = 1$ の線に張り付いた形をしている。式 (15.21) より、 $y = 0$ から $y = 1$ の間の両端の δ 以下の長さを除く領域において、ローレンツカーブの傾き a は $e^{n(S_1(\mathbf{p} \| \mathbf{q}) - \varepsilon)} \leq a \leq e^{n(S_1(\mathbf{p} \| \mathbf{q}) + \varepsilon)}$ を満たす (図 38)。 $y = 0$ 側の端の領域の

²³⁷ $1/\eta$ の補正は考える必要がない。なぜなら、 $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \frac{1}{n} = 0$ だからである。

²³⁸ 「チェルノフ・スタインの補題」ともいう。

²³⁹ Thomas M. Cover and Joy A. Thomas, "Elements of Information Theory", Wiley では典型集合を用いた方法で証明されている (Theorem 11.8.3)

ローレンツカーブの傾きは $e^{nS_1(\mathbf{p}||\mathbf{q})+\varepsilon}$ 以上であることを思い出せば、 $M^\eta(\mathbf{p}^{\otimes n}||\mathbf{q}^{\otimes n})$ はローレンツカーブと $y = \eta$ の交点の x 座標なので

$$(\eta - \delta)e^{-n(S_1(\mathbf{p}||\mathbf{q})+\varepsilon)} \leq M^\eta(\mathbf{p}^{\otimes n}||\mathbf{q}^{\otimes n}) \leq \eta e^{-n(S_1(\mathbf{p}||\mathbf{q})-\varepsilon)} \quad (15.22)$$

が満たされる。よって仮説検定ダイバージェンスレート $\frac{1}{n}S_H^\eta(\mathbf{p}^{\otimes n}||\mathbf{q}^{\otimes n}) = -\frac{1}{n}\ln \frac{1}{\eta}M^\eta(\mathbf{p}^{\otimes n}||\mathbf{q}^{\otimes n})$ は

$$S_1(\mathbf{p}||\mathbf{q}) - \varepsilon \leq \frac{1}{n}S_H^\eta(\mathbf{p}^{\otimes n}||\mathbf{q}^{\otimes n}) \leq S_1(\mathbf{p}||\mathbf{q}) + \varepsilon - \frac{1}{n}\ln \frac{\eta - \delta}{\eta} \quad (15.23)$$

と評価できる。 ε, δ は n を大きくすることでいくらでも小さくすることが出来るので、上の式はスタインの補題の成立を示している。□

15.3 応用：状態変換の漸近論

ダイバージェンスと仮説検定の応用として、7章で扱った d-majorization の問題を考えよう。定理 7.6 で示したように、 $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}', \mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q}'$ という変換を与える確率行列が存在する必要十分条件は、 (\mathbf{p}, \mathbf{q}) のローレンツカーブが $(\mathbf{p}', \mathbf{q}')$ のローレンツカーブの上を通過することであった。ここではこれをより一般化して、状態（コピー）が多数存在する状況で、多数のコピー同士の変換を扱うという、漸近的（asymptotic）な設定を考えることにしよう。つまり、 n が大きい状況で、 $\mathbf{q}^{\otimes n}$ を $\mathbf{q}'^{\otimes n}$ に移すという状況である。

我々は特に、 $\mathbf{q}^{\otimes n} \rightarrow \mathbf{q}'^{\otimes n}$ の変換は厳密（誤差なし）だが、 $\mathbf{p}^{\otimes n} \rightarrow \mathbf{p}'^{\otimes n}$ の変換については任意に小さい近似誤差を許すことにする。すなわち、任意の近似誤差 $\varepsilon > 0$ に対し、十分大きい n が存在し、 $\mathbf{p}^{\otimes n} \rightarrow \omega$ 、 $|\omega - \mathbf{p}'^{\otimes n}|_1 < \varepsilon$ と出来るのであれば、 \mathbf{p} から \mathbf{p}' に漸近論の意味で変換できたとみなすことにする²⁴⁰。この設定の下では、 (\mathbf{p}, \mathbf{q}) から $(\mathbf{p}', \mathbf{q}')$ への漸近的な変換可能性は、極めてシンプルな形で書ける。

定理 15.8 (d-majorization の漸近論). (\mathbf{p}, \mathbf{q}) と $(\mathbf{p}', \mathbf{q}')$ が与えられている。 $(\mathbf{p}', \mathbf{q}')$ は (\mathbf{p}, \mathbf{q}) の並べ替えではないものとする²⁴¹。任意の $\varepsilon > 0$ に対し、十分大きい n と n コピー間の確率行列 T が存在し、

$$T(\mathbf{q}^{\otimes n}) = \mathbf{q}'^{\otimes n}, \quad T(\mathbf{p}^{\otimes n}) = \omega \quad |\omega - \mathbf{p}'^{\otimes n}|_1 < \varepsilon \quad (15.24)$$

を満たすように出来る必要十分条件は、

$$S_1(\mathbf{p}||\mathbf{q}) > S_1(\mathbf{p}'||\mathbf{q}') \quad (15.25)$$

である。

特に $\mathbf{q} = \mathbf{q}' = \mathbf{p}^{\text{Gibbs}}$ とした場合には、この問題は「ギブス保存写像で \mathbf{p} から \mathbf{p}' に変換できる必要十分条件は何か」という問題になる。ギブス保存写像による変換は、「温度 T の等温環境の下での状態変換」とみなせる²⁴²。そしてこの場合には、相対エントロピー $S_1(\mathbf{p}||\mathbf{p}^{\text{Gibbs}})$ は非平衡自由エネルギー²⁴³ に一致する。すなわち、状態の変換可能性が自由エネルギーの大小関係だけで決まるという、熱力学第二法則の一表現が再現されたことになる。

この結果を証明するために、まず二つの定理を示す。一つ目は、レニーダイバージェンスが変換の十分条件を与えるという結果である。

²⁴⁰ このような設定は「vanishing error」と呼ばれており、この研究領域においては標準的に用いられる設定である。

²⁴¹ $S_1(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = S_1(\mathbf{p}'||\mathbf{q}')$ という等号達成の状況を排除するために、この条件が追加されている（ $\mathbf{p} = \mathbf{p}', \mathbf{q} = \mathbf{q}'$ ならば自明に変換可能なので）。

²⁴² 7.3 節でもすでに述べたように、「ギブス保存写像で変換できること」と「その温度のギブス状態の補助系を接触させ、全体に対してエネルギー保存する変換を施すこと」は等価である。後者は物理的意味がかなり明瞭であろう。

²⁴³ 系のエントロピーをシャノンエントロピーで表すことにした、ヘルムホルツの自由エネルギー $F = U - TS$ のこと。

定理 15.9. $(\mathbf{p}, \mathbf{q}), (\mathbf{p}', \mathbf{q}')$ は

$$S_0(\mathbf{p}||\mathbf{q}) \geq S_\infty(\mathbf{p}'||\mathbf{q}') \quad (15.26)$$

を満たすとする。このとき、 $\mathbf{p}' = T\mathbf{p}, \mathbf{q}' = T\mathbf{q}$ を満たす確率行列 T が存在する。

証明. これは図 39 を見るのが早いであろう。 $e^{S_0(\mathbf{p}||\mathbf{q})}$ は、 (\mathbf{p}, \mathbf{q}) のローレンツカーブにおいて、 $y = 1$ に最初に接する部分と原点とを結んだ直線の傾きである。一方、 $e^{S_\infty(\mathbf{p}'||\mathbf{q}')}$ は、 $(\mathbf{p}', \mathbf{q}')$ のローレンツカーブの最初（一番急な場所）の傾きである。よって、 $S_0(\mathbf{p}||\mathbf{q}) \geq S_\infty(\mathbf{p}'||\mathbf{q}')$ の状況では、図より明らかなように、必ず (\mathbf{p}, \mathbf{q}) のローレンツカーブは $(\mathbf{p}', \mathbf{q}')$ のそれよりも常に上に位置する。あとは定理 7.6 を用いることにより、 $\mathbf{p}' = T\mathbf{p}, \mathbf{q}' = T\mathbf{q}$ を満たす確率行列 T が存在することがわかる。□

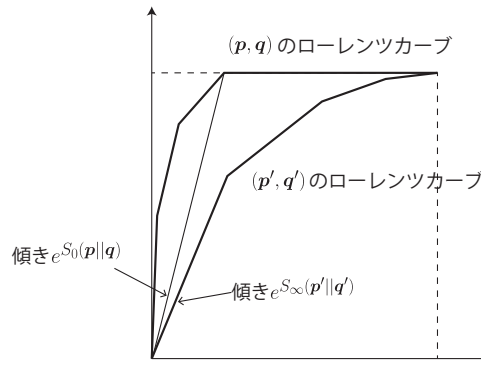


図 39: $S_0(\mathbf{p}||\mathbf{q}) \geq S_\infty(\mathbf{p}'||\mathbf{q}')$ を満たすローレンツカーブの関係。

次に、レニーダイバージェンスと仮説検定ダイバージェンスを結び付ける結果を紹介する。そのために、レニーダイバージェンスに対する「スムーシング (smoothing)」を導入する。これは、レニーダイバージェンスが持つ特異性を除去する技法でもある。

以下、 $\mathcal{B}^\varepsilon(\mathbf{p})$ で、 $\|\mathbf{r} - \mathbf{p}\|_1 \leq \varepsilon$ を満たす分布 \mathbf{r} の集合を表す。これは、半径 ε 、中心 \mathbf{p} の「球」のようなものである。

定義 15.6 (スムースレニー $0/\infty$ -ダイバージェンス). スムースにしたレニー $0/\infty$ -ダイバージェンスを、以下のように定義する。

$$S_0^\varepsilon(\mathbf{p}||\mathbf{q}) := \max_{\mathbf{r} \in \mathcal{B}^\varepsilon(\mathbf{p})} S_0(\mathbf{r}||\mathbf{q}) \quad (15.27)$$

$$S_\infty^\varepsilon(\mathbf{p}||\mathbf{q}) := \min_{\mathbf{r} \in \mathcal{B}^\varepsilon(\mathbf{p})} S_\infty(\mathbf{r}||\mathbf{q}) \quad (15.28)$$

レニー 0 は一番小さいダイバージェンスなので少し増やす向きに、レニー ∞ は一番大きいダイバージェンスなので少し減らす向きに、最適化がなされている。特に我々が主に念頭に置く状況は、 ε が非常に小さい状況である。このとき、スムースレニーダイバージェンスは、分布を \mathbf{p} から微小に動かして、最大・最少を探することで得られる量である²⁴⁴。

我々はさらにテクニカルな理由から、状態を確率的に分割する操作も認めることにする（これは必ずしも一般的なものではない）。具体的には、 $1 \sim n$ の n 状態上の確率分布から、状態 i を確率 λ で $i1$ 、確率 $1 - \lambda$

²⁴⁴レニー 0 -ダイバージェンスは、 p_i がゼロか非ゼロかに依って値が大きく動くので、各 p_i の値がゼロに向かうような状況（漸近論だとこれが実現する）では、スムースにして $\varepsilon \rightarrow 0$ をとった場合と元のレニーダイバージェンス場合とで値が一致しない場合がある。

で i_2 に分けた $n + 1$ 状態上の確率分布を得る操作を許すことにする。これはローレンツカーブでいうと、ローレンツカーブ上のある直線を、二つの直線に分割することに対応しており、ローレンツカーブはこの操作の前後で変化しない。状態分割を許して最適化を行ったスムーズレニーダイバージェンスを、通常定義のものから区別するために S^ε と書くことにする。

非常に重要な事実、スムーズレニーダイバージェンスと仮説検定ダイバージェンスの間に密接な結びつきがある点である。

定理 15.10. レニーダイバージェンスをスムーシングし、さらに状態の確率的分割を許すこととする²⁴⁵。このとき、以下が成り立つ。

$$\tilde{S}_0^\varepsilon(\mathbf{p}||\mathbf{q}) \geq S_H^{1-\varepsilon/2}(\mathbf{p}||\mathbf{q}) \quad (15.29)$$

$$\tilde{S}_\infty^\varepsilon(\mathbf{p}||\mathbf{q}) \leq S_H^{\varepsilon/2}(\mathbf{p}||\mathbf{q}) \quad (15.30)$$

証明. まず式 (15.29) を示す。定理 15.6 により、 $M^{1-\varepsilon/2}(\mathbf{p}||\mathbf{q})$ は (\mathbf{p}, \mathbf{q}) のローレンツカーブの $y = 1 - \varepsilon/2$ における x の値である。さて、ここから図 40 のように、 \mathbf{p} を少し変えた $\bar{\mathbf{p}}$ にしてローレンツカーブを（必要なら状態分割して）変形すると、 $S_0(\bar{\mathbf{p}}||\mathbf{q}) = S_H^{1-\varepsilon/2}(\mathbf{p}||\mathbf{q}) - \ln(1 - \varepsilon/2) \geq S_H^{1-\varepsilon/2}(\mathbf{p}||\mathbf{q})$ が実現する。 $\bar{\mathbf{p}}$ と \mathbf{p} の距離は $\varepsilon/2$ 以下なので、 $\tilde{S}_0^\varepsilon(\mathbf{p}||\mathbf{q}) \geq S_0(\bar{\mathbf{p}}||\mathbf{q})$ である。以上を組み合わせることで式 (15.29) が示される。

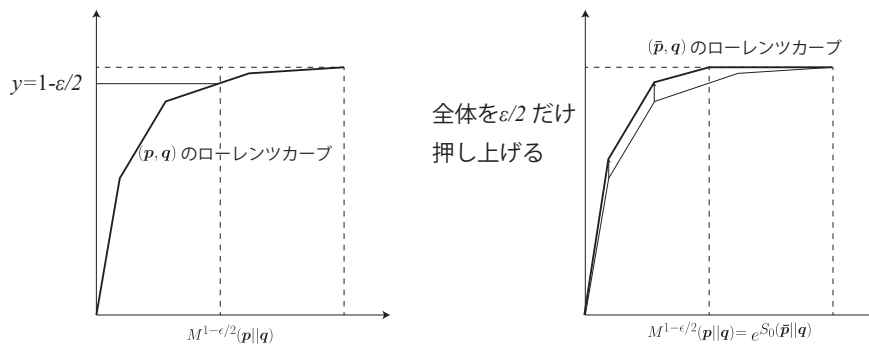


図 40: (左): $M^{1-\varepsilon/2}(\mathbf{p}||\mathbf{q})$ は、 (\mathbf{p}, \mathbf{q}) のローレンツカーブの $y = 1 - \varepsilon/2$ における x の値に対応する。(右): \mathbf{p} を、ローレンツカーブが全体に上に $\varepsilon/2$ だけ上昇するように変えた分布を $\bar{\mathbf{p}}$ とする。すると、 $e^{S_0(\bar{\mathbf{p}}||\mathbf{q})}$ はこのローレンツカーブが $y = 1$ に初めて接した点の x 座標なので、 $M^{1-\varepsilon/2}(\mathbf{p}||\mathbf{q})$ に一致する。

次に式 (15.30) を示す。証明の仕方は先ほどとほぼ同様である。定理 15.6 により、 $M^{\varepsilon/2}(\mathbf{p}||\mathbf{q})$ は (\mathbf{p}, \mathbf{q}) のローレンツカーブの $y = \varepsilon/2$ における x の値である。さて、ここから図 41 のように、 \mathbf{p} を少し変えた $\bar{\mathbf{p}}$ にしてローレンツカーブを（必要なら状態分割して）変形すると、 $S_\infty(\bar{\mathbf{p}}||\mathbf{q}) = S_H^{\varepsilon/2}(\mathbf{p}||\mathbf{q})$ が実現する。 $\bar{\mathbf{p}}$ と \mathbf{p} の距離は $\varepsilon/2$ 以下なので、式 (15.30) が示される。□

ではいよいよ、求めたかった d-majorization の漸近論を示そう。

定理 15.8 の証明. 必要性は、相対エントロピーの単調性とその等号成立条件から明らかなので、ここでは十分性を示す。以下、 $S_1(\mathbf{p}||\mathbf{q}) > S_1(\mathbf{p}'||\mathbf{q}')$ を仮定して、欲しい確率行列 T の存在を示す。

与えられた $\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{p}', \mathbf{q}'$ が $S_1(\mathbf{p}||\mathbf{q}) > S_1(\mathbf{p}'||\mathbf{q}')$ を満たすならば、スタインの補題 (定理 15.7) により、十分大きい n が存在し、仮説検定ダイバージェンスについて

$$\frac{1}{n} S_H^{1-\varepsilon/4}(\mathbf{p}^{\otimes n}||\mathbf{q}^{\otimes n}) > \frac{1}{n} S_H^{\varepsilon/4}(\mathbf{p}'^{\otimes n}||\mathbf{q}'^{\otimes n}) \quad (15.31)$$

²⁴⁵ 状態分割を許さない通常のスムーズレニーダイバージェンスを用いる場合には、後述するような望ましい形でのローレンツカーブ変形が必ずしもできないので、不等式はもう少し技巧的になり、式もやや汚くなるが、似たような不等式を示すことができる。

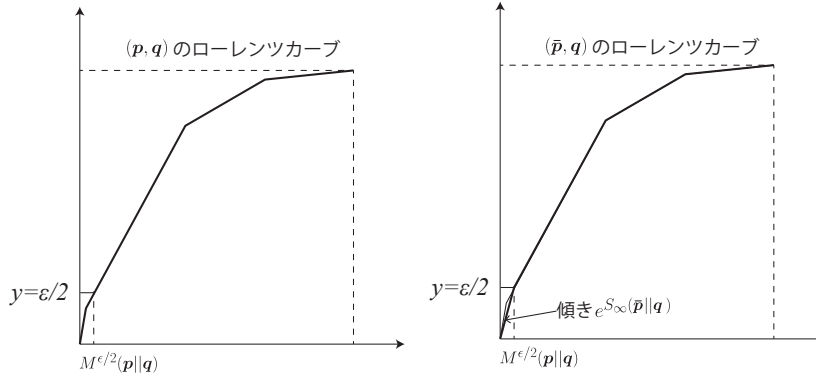


図 41: (左) $M^{\epsilon/2}(\mathbf{p}||\mathbf{q})$ は、 (\mathbf{p}, \mathbf{q}) のローレンツカーブの $y = \epsilon/2$ における x の値に対応する。(右) \mathbf{p} を、原点近傍を少し歪ませて、原点から点 $(M^{\epsilon/2}(\mathbf{p}||\mathbf{q}), \epsilon/2)$ までが一直線になるようにした際の分布を $\bar{\mathbf{p}}$ とする。すると、 $e^{S_{\infty}(\bar{\mathbf{p}}||\mathbf{q})}$ はこのローレンツカーブの最初の傾きなので、 $e^{S_{\infty}(\bar{\mathbf{p}}||\mathbf{q})} = \epsilon/2 M^{\epsilon/2}(\mathbf{p}||\mathbf{q})$ が成り立つ。

が成り立つように出来る。これと定理 15.10 を組み合わせることにより、この n に対するレニーダイバージェンスについて

$$\tilde{S}_0^{\epsilon/2}(\mathbf{p}^{\otimes n}||\mathbf{q}^{\otimes n}) > \tilde{S}_{\infty}^{\epsilon/2}(\mathbf{p}'^{\otimes n}||\mathbf{q}'^{\otimes n}) \quad (15.32)$$

という関係が成り立つ。すなわち、(必要ならば状態分割を施した) 状態 $\bar{\mathbf{P}}, \bar{\mathbf{P}}'$ で、 $|\bar{\mathbf{P}} - \mathbf{p}^{\otimes n}| < \frac{\epsilon}{2}$ 、 $|\bar{\mathbf{P}}' - \mathbf{p}'^{\otimes n}| < \frac{\epsilon}{2}$ を満たしており²⁴⁶、かつ

$$S_0(\bar{\mathbf{P}}||\mathbf{q}^{\otimes n}) > S_{\infty}(\bar{\mathbf{P}}'||\mathbf{q}'^{\otimes n}) \quad (15.33)$$

を満たすものが存在する。すると定理 15.9 により、確率行列 T で、 $\bar{\mathbf{P}}' = T\bar{\mathbf{P}}$ 、 $\mathbf{q}'^{\otimes n} = T(\mathbf{q}^{\otimes n})$ を満たすものが存在する。

この T が、 $\mathbf{p}^{\otimes n}$ から $\mathbf{p}'^{\otimes n}$ に近似的に移す確率行列であることを示そう。確率的な状態分割を行っている場合には、分割後の状態に作用するそれぞれの確率行列を、一つの状態に作用する確率的に混ぜ合わせた確率行列とみなすことにより²⁴⁷、 T は d^n 個の状態上の確率分布 $\mathbf{p}^{\otimes n}$ に作用する確率行列と解釈することができる。このとき、

$$|T(\mathbf{p}^{\otimes n}) - \mathbf{p}'^{\otimes n}|_1 \leq |T(\mathbf{p}^{\otimes n}) - T\bar{\mathbf{P}}|_1 + |\bar{\mathbf{P}}' - \mathbf{p}'^{\otimes n}|_1 \leq |\mathbf{p}^{\otimes n} - \bar{\mathbf{P}}|_1 + |\bar{\mathbf{P}}' - \mathbf{p}'^{\otimes n}|_1 < \frac{\epsilon}{2} + \frac{\epsilon}{2} < \epsilon \quad (15.34)$$

となり、確かに確率行列 T は $\mathbf{p}^{\otimes n}$ から $\mathbf{p}'^{\otimes n}$ に近似精度 ϵ で移している。ただし一つ目の不等式では三角不等式および $\bar{\mathbf{P}}' = T\bar{\mathbf{P}}$ を、二つ目の不等式では L^1 ノルムのマルコフ過程に対する単調性を用いている。□

15.4 <補論>：量子熱力学

本章で述べた結果は、テクニカルには面倒が増えるが、本質的な部分はほとんどそのままにして量子に拡張することができる。ここでは、どのように定義や定理が量子の場合に拡張されるのかについて、簡単にコメントする。なお、量子系の密度行列表示などの量子力学の知識を知っていることは前提とする。

レニーダイバージェンスは、量子の場合には状態の非可換性のため定義が一意的でなくなる。まず、 $\alpha =$

²⁴⁶ 状態分割をしている場合には、 $\mathbf{p}^{\otimes n}$ もまた同様の分割をしている条件の下で L^1 -ノルムを計算する。

²⁴⁷ 例えば状態 i が確率 λ で $i1$ 、確率 $1 - \lambda$ で $i2$ に分割されているとする。確率行列 T によって $i1$ から j に移される確率は $T_{j,i1}$ 、 $i2$ から j に移される確率は $T_{j,i2}$ と表されているが、分割前の状態に作用する確率行列として $T'_{j,i} = \lambda T_{j,i1} + (1 - \lambda)T_{j,i2}$ を考え、これを改めて T と置けば、状態分割を経る必要がなくなる。

0, 1, ∞ という三つのよく使う場合については、それぞれ

$$S_0(\rho||\sigma) := -\ln[\text{Tr}[P_\rho\sigma]] \quad (15.35)$$

$$S_1(\rho||\sigma) := \text{Tr}[\rho \ln \rho - \rho \ln \sigma] \quad (15.36)$$

$$S_\infty(\rho||\sigma) := \ln \|\sigma^{-1/2}\rho\sigma^{-1/2}\|_\infty = \ln[\min\{\lambda|\rho \leq \lambda\sigma\}] \quad (15.37)$$

と定義されるのが一般的である。ただし P_ρ は ρ のサポートへの射影である。一般のレニー α -ダイバージェンスの量子への拡張としてよく用いられている定義としては

$$S_\alpha^{\text{Lieb}}(\rho||\sigma) := \frac{1}{\alpha-1} \ln \text{Tr}[\rho^\alpha \sigma^{1-\alpha}] \quad (15.38)$$

$$S_\alpha^{\text{sand}}(\rho||\sigma) := \frac{1}{\alpha-1} \ln \text{Tr} \left[\left(\sigma^{(1-\alpha)/2\alpha} \rho \sigma^{(1-\alpha)/2\alpha} \right)^\alpha \right] \quad (15.39)$$

の二つがある。ただ「量子レニー α -ダイバージェンス」というと、前者を指す場合が多い気がする。後者は「サンドイッチレニー α -ダイバージェンス」と呼ぶことが多い。

S_α^{Lieb} は $\alpha \rightarrow 0$ で式 (15.35) の S_0 の定義に一致する。また $0 \leq \alpha \leq 2$ で単調性を満たす。一方、 S_α^{sand} は $\alpha \rightarrow \infty$ で式 (15.37) の S_∞ の定義に一致する。また $\frac{1}{2} \leq \alpha$ で単調性を満たす。

量子仮説検定は、状態が ρ か σ かを判別する課題を考える。状態の推定は、 $\{P, Q\}$ ($Q = I - P$) で特徴づけられる二値の POVM 測定²⁴⁸ を行うと解釈することで、古典の場合の仮説検定と同様の定義をすることができる²⁴⁹。

量子版のネイマン・ピアソンの補題は、 P として

$$T(a) = \rho - e^a \sigma \quad (15.40)$$

を用いるのが、第一種過誤を一定にしたもとで第二種過誤を最小化するプロトコルであると主張する (a は $T(a)$ が半正定値である範囲で動く)。仮説検定ダイバージェンスは

$$S_H^\eta := -\ln \left(\frac{1}{\eta} \min_{\substack{0 \leq Q \leq I, \\ \text{Tr}[\rho Q] \geq \eta}} \text{Tr}[\sigma Q] \right) \quad (15.41)$$

と定義される。ただし和の下の不等式は演算子 (エルミート行列) に対する不等式である。

スタインの補題も量子においてもそのまま成り立つ。ただし証明は大幅に変更する必要がある。最初の証明は、順方向と逆方向がそれぞれ Hiai-Petz と Ogawa-Nagaoka によって与えられた²⁵⁰。また、半正定値計画問題の双対定理を利用した証明が Sagawa らによって与えられている²⁵¹。双対定理を利用することで、「最小値が求めたい値以下にならないこと (任意の場合をカバーする必要があるので証明が大変)」の証明が、「別の最大化問題において、その値を達成できること (達成を実現する一つの具体例を与えればよい)」によって示せるので、証明が容易になる。

d-majorization の漸近論は、量子の場合でもそのままの証明方針により、そのままの形で成り立つ²⁵²。ただし確率行列による変換は、一般の CPTP 写像と読み替えるレニーダイバージェンスのスムージングの定義は、量子の場合も同じである (L^1 ノルムをシャッテン 1-ノルム (トレースノルム) にする)。変換の十分

²⁴⁸ Positive Operator-Valued Measure の頭文字をとったもの。射影測定をより一般化し、測定の反作用は小さいが測定誤差は大きい場合なども含めた、任意の量子測定をカバーするような枠組である。

²⁴⁹ $P = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ と書けているとすると、この測定は「系の状態が $|\psi_i\rangle$ であれば、確率 λ_i で P 、 $1 - \lambda_i$ で Q と出力する」というものだとして理解できる。 λ_i が 0 または 1 しかとらない状況が、古典の場合の決定論的推定に対応する。

²⁵⁰ F. Hiai and D. Petz, *The proper formula for relative entropy and its asymptotics in quantum probability*. Comm. Math. Phys. **143**, 99 (1991) 及び T. Ogawa and H. Nagaoka, *Strong Converse and Stein's Lemma in Quantum Hypothesis Testing*. Asymptotic Theory of Quantum Statistical Inference, 28 (2005).

²⁵¹ この方針での証明は、Takahiro Sagawa, Philippe Faist, Kohtaro Kato, Keiji Matsumoto, Hiroshi Nagaoka and Fernando G S L Brandão, *Asymptotic reversibility of thermal operations for interacting quantum spin systems via generalized quantum Stein's lemma*, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, Volume 54, Number 49 (2021) で見れる (i.i.d. よりも一般化した問題設定を扱っている)。

²⁵² Naoto Shiraiishi and Takahiro Sagawa, *Quantum thermodynamics of correlated-catalytic state conversion at small-scale*, Phys. Rev. Lett. **126**, 150502 (2021)

条件を与える定理 15.9 は、そのままの形で成り立つ。レニーダイバージェンスと仮説検定ダイバージェンスの関係を与える定理 15.10 は、状態分割のテクニックが量子では使えず、補正項がつくなどやや汚い形にはなるが、似たような不等式が得られる²⁵³。

²⁵³ 具体的な不等式を知りたい人は、T. Sagawa, "Entropy, Divergence, and Majorization in Classical and Quantum Thermodynamics", Springer の Appendix B を参照していただきたい。

16 <補論>：確率論的方法

この章では、初めて見る人にとっては恐らく予想もしないような証明手法である「確率論的方法 (probabilistic method)」を、いくつかの具体例で見ていく。これは確率要素の全くない純粋な存在命題の証明において、確率を導入することで命題の証明を行うというものである。

確率論的方法で着目する事実は「ゼロでない確率で生じるものは存在する」というものである。例えば「ある条件を満たすグラフは存在するか」という問題を考えているとする。このとき、何らかの確率分布に従ってグラフを確率的に生成したとき、その条件を満たすグラフが得られる確率が真にゼロより大きいと言えたとしよう。この事実から、その条件を満たすグラフは当然少なくとも一つは存在しないとはいけないことが分かる。これが確率論的方法による証明である。

「存在することを示すのが難しいのに、それが非ゼロの確率で生じることが言えることがありうるだろうか」と疑問に思うかもしれない。しかし、確率論的方法の長所は、その存在を構成的 (constructive) に示す必要がないという点である。具体的にその存在を構成する形の存在証明の場合には、どのように構成するのか、一つずつ細かく指定しないと行けないので、このアプローチは非常に難しい場合も多い。これに対し、具体的な指定をするのは大変だが、どういう風にすればおおよそ条件を満たすものになるのかが分かっている状況では、確率論的なアプローチが機能しうる。特に「ランダム」に近い場合には示したい性質が高い確率で満たされるが、整然としたきれいなグラフではその性質が満たされないという場合には、確率論的手法が強力な武器となりうる。

16.1 確率的な手法の具体例

確率論的方法がどのような手法なのかは、抽象的な説明を並べるよりも、具体例を見た方が理解しやすいだろう。そこでまず、凸性の章で見たカラテオドリの定理 (定理 6.1) の近似版を考えることにしよう。カラテオドリの定理は、 n 次元空間中の凸集合の内部の点は、 $n+1$ 個の端点の内分点で表せるという定理であった。また、少し考えることで、この凸集合が有限個の頂点を結んで作られる立体の場合、 $n+1$ 個の端点を用いなくとも表せない点がほとんどすべてであることも分かる²⁵⁴。しかし、カラテオドリの定理を近似的なものに緩めれば、必要な点の数は劇的に少なくて済むようになる。

問題：ある凸集合が半径 1 の n 次元球の中にある。このとき、この凸集合に含まれる任意の点 \mathbf{x} について、その (2-ノルムの意味での) $\frac{1}{\sqrt{k}}$ 近似は、 k 個の端点の均等混合で実現可能である。すなわち、適切な k 個の端点²⁵⁵ $\mathbf{z}_{i_1}, \dots, \mathbf{z}_{i_k}$ が存在し、

$$\left\| \mathbf{x} - \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k \mathbf{z}_{i_j} \right\|_2 \leq \frac{1}{\sqrt{k}} \quad (16.1)$$

が成り立つ。このことを示せ²⁵⁶。

証明. 任意の \mathbf{x} に対し、カラテオドリの定理より、 $n+1$ 個の端点が存在し、 \mathbf{x} はその内分で書ける。以下、添え字を振り直して、この $n+1$ 個の端点を $\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n+1}$ とし、 \mathbf{x} を与える内分の方法を $\mathbf{x} = \sum_i \lambda_i \mathbf{z}_i$ とする。

ここで、確率 λ_i で \mathbf{z}_i をとるような確率変数 \mathbf{Z} を考える。構成より明らかに $\langle \mathbf{Z} \rangle = \mathbf{x}$ である。この確率変数を $\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \dots, \mathbf{Z}_k$ と k 個生成し、その経験平均 $\frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{Z}_i$ を考える。大数の法則により、 k を大きくする極限でこの量は \mathbf{x} に確率 1 で収束する。この振る舞いをきちんと評価することで、証明したい式 (16.1) を示す。

経験平均の \mathbf{x} からの 2-ノルムの誤差の平均は

$$\left\langle \left\| \mathbf{x} - \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{Z}_i \right\|_2^2 \right\rangle = \frac{1}{k^2} \left\langle \left\| \sum_{i=1}^k (\mathbf{Z}_i - \langle \mathbf{Z} \rangle) \right\|_2^2 \right\rangle = \frac{1}{k^2} \sum_{i=1}^k \langle \|\mathbf{Z}_i - \langle \mathbf{Z} \rangle\|_2^2 \rangle \leq \frac{1}{k} \langle \|\mathbf{Z}\|_2^2 \rangle \leq \frac{1}{k} \quad (16.2)$$

²⁵⁴ n 個の端点の内分点で表せる空間は n 次元空間までであり、これが $n+1$ 次元空間に占める体積はゼロである。

²⁵⁵ ただし同じ端点を重複して用いることは許す。

²⁵⁶ 以下の証明は、R. Vershynin, *High-Dimensional Probability*, Cambridge University Press の序章に基づく。

と評価できる。ここで、一つ目の等式では $\mathbf{x} = \langle \mathbf{Z} \rangle$ を用いた。二つ目の等式では、独立な確率変数の和の分散は、各確率変数の分散の和に等しいことを用いた。最初の不等式は分散（2次キュムラント）よりも2次モーメントの方が大きいことを、最後の不等式は \mathbf{Z} が半径1の球内にあることを用いた。

$\left| \mathbf{x} - \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{Z}_i \right|_2^2$ の平均が $\frac{1}{k}$ を下回っているのだから、少なくとも一つの $\mathbf{Z}_1, \dots, \mathbf{Z}_k$ の選び方においては、 $\left| \mathbf{x} - \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{Z}_i \right|_2^2$ の値自体が $\frac{1}{k}$ を下回る。よって示された。 \square

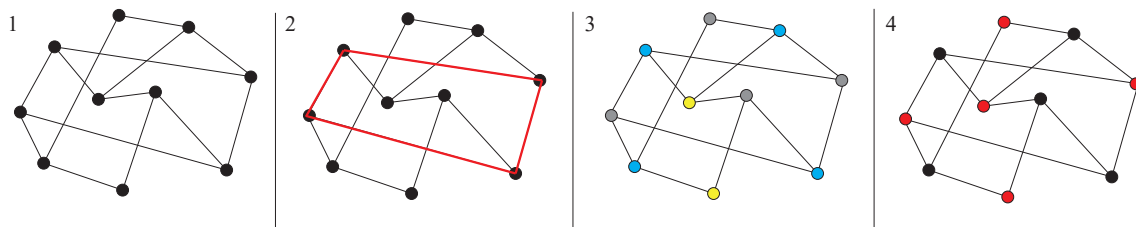


図 42: 1: グラフの例。2: グラフの内周。今回の場合、3-サイクルはなく、4-サイクル（赤線）は存在するので、このグラフの内周は4である。3: グラフの彩色。今回の場合、2-彩色は出来ず、図のように3-彩色は可能なので、彩色数は3である。4: グラフの独立数。今回の場合、最大独立数は5（赤色の頂点の集合）である。

別の具体例として、ある条件を満たすグラフの存在を示す問題を考えよう。頂点から辺を辿って自分自身に戻ってくる路を「サイクル (cycle)」と呼び、あるグラフの最短のサイクルの長さ²⁵⁷を「内周 (girth)」と呼ぶ。グラフ G の内周を $g(G)$ と書くことにする。例えば図 42.1 のグラフでは、3-サイクル（三角形）はなく、4-サイクルは赤線のもの（図 42.2）が存在するので、このグラフの内周は4である。

また、辺で隣接する頂点同士は異なる色になるように頂点に色を塗る際に、必要となる色の種類の最小を「彩色数 (chromatic number)」と呼ぶ。グラフ G の彩色数を $\chi(G)$ と書くことにする。例えば図 42.1 のグラフでは、2-彩色は不可能（5-サイクルがあるので）だが、3-彩色は図 42.3 のように可能なので、このグラフの彩色数は3である。

さらに、互いに隣接しない頂点からなる集合を「独立集合 (independent set)」と呼び、最大の独立集合の大きさを「最大独立数 (max independent number)」と呼ぶ。グラフ G の最大独立数を $\alpha(G)$ と書くことにする。例えば図 42.1 のグラフでは、図 42.4 で示されている赤い5頂点の集合が最大独立集合であり、そのため最大独立数は5である。グラフ彩色を行った際、ある一色が塗る頂点の集合は必ず独立集合となるので、頂点数は彩色数と最大独立数の積で上から押さえられる ($|V| \leq \chi(G)\alpha(G)$) ことが分かる。

彩色数が大きなグラフの例としては k -クリーク (k -完全グラフ: どの k 個の頂点も、その他の $k-1$ 個の頂点と辺で結ばれているグラフ) が挙げられる。 k -クリークの彩色数は k である。すなわち、このグラフを彩色するには全頂点を異なる色に塗る必要がある。クリークは3-サイクルを含むので、クリークの内周は常に3である。

一方、内周が大きなグラフとしては、木 (tree: サイクルを一切含まないグラフ) が挙げられる（この場合は内周は無限大とする）。この場合、木グラフの彩色数は2である。つまり2色あれば塗り分けが可能である。

このように見ると、彩色数が大きいグラフは内周が小さく、内周が大きいグラフは彩色数が小さそうに思えるかもしれない。しかし、実はそうではないことが証明出来る。

問題: 任意の k について、彩色数が k より大きく、内周も k より大きいグラフが存在することを示せ²⁵⁸。

これは確率論的方法によって解かれる代表的な問題である²⁵⁹。証明は以下のように行う。まず適切な p のエルデシュ・レーニャーランダムグラフは、ほとんど確実に彩色数が非常に大きく、また短いサイクルも非常に少ないことが示せる。そこで、短いサイクルに含まれる頂点を一つずつ除去すると、短いサイクルは一切なく、また彩色数も大きなままであることが示せる。これが求めたいグラフである。

²⁵⁷すべての辺の長さを1としている。なので、「長さ」は「通過した辺の数」とも言い換えられる。

²⁵⁸以下の証明は、R. ディースティル『グラフ理論』丸善出版 第11章に基づく。

²⁵⁹ただし、後にグラフを具体的に構成することにも成功している。L. Lovász, *On chromatic number of finite set-systems*, Acta Mathematica Academiae Scientiarum Hungarica volume 19, pages 59–67 (1968) ただしこの証明では、グラフのサイズがアッカーマン関数的に増大するので、例えば $k=5$ のような大きさであってもそのグラフを具体的に書き下すのは極めて大変である。

証明. 十分大きい頂点数 n 、パラメータ p ($n^{\varepsilon-1} \geq p \geq (6k \ln n)/n$) のエルデシュ・レニーランダムグラフを考える。

まずこのグラフの彩色数を評価するため、我々はこのグラフの最大独立数の評価を行う。最大独立数が r 以上であるためには、ある r 個の頂点の組があり、その組の中にはただ一つも辺が引かれていない必要がある。ある固定した r 個の組に対して辺が一つも引かれえない確率は $(1-p)^{r(r-1)/2}$ 、 n 個の頂点から r 個の組を選ぶ場合の数は $\binom{n}{r}$ なので、最大独立数が r 以上である確率は

$$P[a \geq r] \leq \binom{n}{r} (1-p)^{r(r-1)/2} \leq \left(n(1-p)^{(r-1)/2}\right)^r \leq \left(ne^{-p(r-1)/2}\right)^r \quad (16.3)$$

と上から押さえられる。特に $r \geq n/2k$ と選ぶと、 $pr \geq 3 \ln n$ なので、上の不等式の右辺は

$$\left(ne^{-p(r-1)/2}\right)^r \leq \left(n \cdot n^{-3/2} e^{p/2}\right)^r \leq \left(\frac{e}{n}\right)^{r/2} \quad (16.4)$$

と評価できる。ただし最後の不等式では $p \leq 1$ を用いた。よって $n \rightarrow \infty$ でこの右辺は (n^{-n} の速さで) 0 に収束する。すなわち、最大独立数は n が大きければほとんど確実に $\frac{n}{2k}$ 以下である。

一方、長さ l 以下のサイクルの個数を X とすると、記号 $(n)_i := n(n-1)(n-2)\cdots(n-i+1)$ を用いて、 X の期待値は

$$\langle X \rangle = \sum_{i=3}^l \frac{(n)_i}{2i} p^i \leq \frac{1}{2} \sum_{i=3}^l n^i p^i \leq \frac{l-2}{2} n^l p^l \quad (16.5)$$

と上から押さえられる。ただし $(n)_i/2i$ は頂点数 n のもとでの可能な長さ i のサイクルの総数である²⁶⁰。最後の不等式では $np \geq 1$ が成り立つことを用いている。マルコフの不等式 (定理 9.1) を用いると、

$$P\left[X \geq \frac{n}{2}\right] \leq \frac{\langle X \rangle}{n/2} \leq (l-2)n^{l-1}p^l \leq (l-2)n^{\varepsilon l-1} \quad (16.6)$$

であり、右辺は $n \rightarrow \infty$ 極限でゼロになる²⁶¹。すなわち、有限の長さ l 以下のサイクルの数はほとんど確実に $\frac{n}{2}$ 個以下である。特に以降 $l = k$ と選ぶ。

以上の議論より、最大独立数 $\frac{n}{2k}$ 以下、かつ長さ k 以下のサイクルの数が $\frac{n}{2}$ 個以下のグラフは存在する。このグラフを G とする。このグラフから、長さ k 以下のサイクル $\frac{n}{2}$ 個について、そのサイクルに含まれる頂点の中から1つを選んで取り除く (その頂点とつながっている辺もすべて取り除く)。このようにして作られるグラフを G' とする。 G' は、 n 頂点のグラフ G から頂点 $\frac{n}{2}$ 個を取り除いて作られているので、頂点数は $\frac{n}{2}$ 個である。 G' は構成より、長さ k 以下のサイクルを持たない。また、最大独立数は頂点を取り除いても増えない²⁶² ので、 $a(G') \leq a(G) \leq \frac{n}{2k}$ である。よって G' の彩色数は

$$\chi(G') \geq \frac{n/2}{a(G')} \geq k \quad (16.7)$$

である。よって G' は内周と彩色数がともに k 以上である。 □

16.2 ロバースの局所補題の利用

前の章で見た確率論的手法は「(たとえわずかでであっても) 有限の確率で発生する事象は存在する」という論法ではあったが、実際には「非常に高い確率で発生する事象」を用いたものだった。これに対し本節では、元々のイメージに近い、「非常に小さいが非ゼロの確率で発生する事象」を利用したタイプの存在証明を見ていく²⁶³。

²⁶⁰ $2i$ で割っているのは、出発点の選び方が i 通り、サイクルをどの向きに回るのかの選び方が 2 通りあるためである。

²⁶¹ ε は $0 < \varepsilon < \frac{1}{k}$ を満たすようにとる必要がある。

²⁶² G' の独立集合は、そのまま G の独立集合でもあるため。

²⁶³ この節の内容は N. Alon and J. H. Spencer, *The probabilistic method*, Wiley の第 5 章に基づく。

着想となるのは次の事実である。 m 個の独立した事象 $\{A_i\}_{i=1}^m$ がそれぞれ確率 $0 < p_i < 1$ で発生する場合、どの事象も生じない確率は $\prod_{i=1}^m (1 - p_i)$ で、これは m が大きければ一般には指数的に小さいが、それでも有限である。そしてもちろん「どの事象も生じない」という状況は存在する。この議論には各事象が独立である必要があったが、完全に独立ではなくても「独立に近い」ならば同様の議論が成り立つ。それを支えるのが以下の「ロバースの局所補題」である。この証明は次の節の補論で与える。

定理 16.1 (ロバースの局所補題 (Lovász local lemma)). m 個の事象 $\{A_i\}_{i=1}^m$ を考える。事象 A_i と独立ではない事象の集合を $\Gamma(A_i)$ と書くことにする。ここで、各事象ごとに数の割り当て $0 \leq x_i < 1$ が存在し、任意の i について

$$P[A_i] \leq x_i \prod_{j \in \Gamma(A_i)} (1 - x_j) \quad (16.8)$$

を満たすように出来るとする。このとき、事象 A_i の否定を \bar{A}_i とすると、

$$P \left[\bigcap_{i=1}^m \bar{A}_i \right] \geq \prod_{i=1}^m (1 - x_i) \quad (16.9)$$

が成り立つ。特にどの事象も生じない確率は真にゼロより大きい²⁶⁴。

多くの応用では、各事象 A_i はいくつかの変数に依存して真偽が定まる命題である。この場合、 A_i と独立でない事象とは、 A_i と用いる変数を共有している事象のことである。

この補題がどのように役立つのかはこのままでは分かりにくいので、例題を見ることにしよう。

問題: m 個の点と、これらが (互いに重なり合いを持ちうる) 多数の点の集合がある。どの集合も少なくとも k 個の点を含み、またどの集合についても、その集合と共通要素を持つ集合の数は高々 d 個であるとする。このとき、 $e(d+1) \leq 2^{k-1}$ が成り立つなら、これら m 個の点を 2 色に塗り分けて、どの集合も単色にならないように出来ることを示せ²⁶⁵。

証明. m 個の点を赤または青に確率 $\frac{1}{2}$ ずつで塗ることにする。事象 A_i として、 i 番目の集合の点の色が単色 (すべて赤、またはすべて青) という事象を選ぶ。明らかに、任意の i で $P[A_i] \leq 1/2^{k-1}$ が成り立つ。そのため、すべての i において $x_i = \frac{1}{d+1}$ と選べば

$$x_i \prod_{j \in \Gamma(A_i)} (1 - x_j) \geq \frac{1}{d+1} \left(1 - \frac{1}{d+1}\right)^d \geq \frac{1}{(d+1)e} \geq \frac{1}{2^{k-1}} \geq P[A_i] \quad (16.10)$$

となり²⁶⁶、ロバースの局所補題の仮定が満たされる。よって、ロバースの局所補題により、事象 A_i がどの i でも生じない、すなわちどの集合も単色にならない事象は有限の確率で発生するので、そのような塗り方は存在する。□

16.3 ロバースの局所補題の証明

この節ではロバースの局所補題の証明を行う。

まず、以下の補題を集合 S のサイズ $s = |S|$ についての数学的帰納法で示す。

²⁶⁴ ロバースの局所補題の証明は非構成的である。すなわち、「どの事象も生じないような具体的な構成方法」(例えば例題における「どの集合も単色にならない塗り方」)は、証明を追っても全く明らかにならない。

これに対し、ロバースの局所補題で存在が保証されている「どの事象も生じないような塗り方」を効率的に見つける「モザー・タードスのアルゴリズム (Moser-Tardos algorithm)」というものが知られている。このアルゴリズムのルールは極めて単純であり、望ましくない事象が生じているのなら、その事象に関わる全変数をランダムに取り替える、という手続きを、すべての事象が生じなくなるまで繰り返す、というものである。(アルゴリズムの実装はとても単純であるが、このアルゴリズムが停止するまでにかかる時間が短いことを証明するのは易しくない)。

²⁶⁵ この問題は「ハイパーグラフの 2 彩色問題」を言い換えたものである。

²⁶⁶ 二番目の不等式は、逆数を考えると $(1 + \frac{1}{d})^d \leq e$ を示せばよく、これは $1 + \frac{1}{d} \leq e^{1/d}$ より直ちに示せる。

補題：ロバースの局所補題の仮定が成り立つとする。任意の集合 $S \subset \{1, 2, \dots, n\}$ と $i \notin S$ について、以下が成り立つ

$$P \left[A_i \mid \bigcap_{j \in S} \bar{A}_j \right] \leq x_i \quad (16.11)$$

$s = 0$ の場合は自明なので、以下 $s = k$ の場合に成立すると仮定して、 $s = k + 1$ の場合に成り立つことを証明する。まず集合 S を、 A_i と独立でないもの ($\Gamma(A_i)$ に含まれるもの) S_1 と、 A_i と独立なもの S_2 に分ける。すると補題左辺は、条件付き確率の基本的な計算により

$$P \left[A_i \mid \bigcap_{j \in S} \bar{A}_j \right] = \frac{P \left[A_i \cap \left(\bigcap_{j \in S_1} \bar{A}_j \right) \mid \bigcap_{j \in S_2} \bar{A}_j \right]}{P \left[\bigcap_{j \in S_1} \bar{A}_j \mid \bigcap_{j \in S_2} \bar{A}_j \right]} \quad (16.12)$$

と分かる。この分子と分母をそれぞれ評価する。

分子は

$$P \left[A_i \cap \left(\bigcap_{j \in S_1} \bar{A}_j \right) \mid \bigcap_{j \in S_2} \bar{A}_j \right] \leq P \left[A_i \mid \bigcap_{j \in S_2} \bar{A}_j \right] = P[A_i] \leq x_i \prod_{j \in \Gamma(A_i)} (1 - x_j) \quad (16.13)$$

と上から押さえられる。

次に分母を評価する。 S_1 が空集合の場合には、分母は 1 となり欲しい式が成り立つ。よって以下では $S_1 = \{j_1, j_2, \dots, j_r\}$ は有限個の要素を持つとして、分母を評価する。分母は、確率の公式 $P[A_1, A_2 | B] = P[A_1 | B]P[A_2 | A_1, B]$ を繰り返し適用することにより、

$$\begin{aligned} P \left[\bigcap_{j \in S_1} \bar{A}_j \mid \bigcap_{j \in S_2} \bar{A}_j \right] &= \prod_{k=1}^r P \left[\bar{A}_{j_k} \mid \bar{A}_1 \cap \dots \cap \bar{A}_{j_{k-1}} \cap \left(\bigcap_{j \in S_2} \bar{A}_j \right) \right] \\ &= \prod_{k=1}^r \left(1 - P \left[A_{j_k} \mid \bar{A}_1 \cap \dots \cap \bar{A}_{j_{k-1}} \cap \left(\bigcap_{j \in S_2} \bar{A}_j \right) \right] \right) \\ &\geq \prod_{k=1}^r (1 - x_{j_k}) \\ &\geq \prod_{j \in \Gamma(A_i)} (1 - x_j) \end{aligned} \quad (16.14)$$

と評価できる。ただし 3 行目の不等式では $S' = S_2 \cup \{1, 2, \dots, j_k - 1\}$ を S と置いて帰納法の仮定を用いた。最後の不等式では $S_1 \subset \Gamma(A_i)$ を用いた。分子と分母の評価を代入することで、示したかった補題が $s = k + 1$ でも成り立つことが言える。

ロバースの局所補題の証明. ロバースの局所補題の左辺 $P \left[\bigcap_{i=1}^m \bar{A}_i \right]$ は、今示した補題を用いることで

$$P \left[\bigcap_{i=1}^m \bar{A}_i \right] = \prod_{i=1}^m P \left[\bar{A}_i \mid \bigcap_{j=1}^{i-1} \bar{A}_j \right] = \prod_{i=1}^m \left(1 - P \left[A_i \mid \bigcap_{j=1}^{i-1} \bar{A}_j \right] \right) \geq \prod_{i=1}^m (1 - x_i) \quad (16.15)$$

と示せる。 □

第 III 部

フーリエ変換と特殊関数

17 線形空間論

この章では、これまで習った線形代数の枠組を、より抽象的かつ公理的な観点から構成し直す。数学科で習う線形代数は、このようなアプローチのものである。実は、フーリエ変換や直交多項式系の議論は、線形空間論の視点から見て、線形代数と同様の形で取り扱うことができる。そのため、ここでは公理的な線形空間論を概観することにする²⁶⁷。

17.1 線形空間

では線形空間（ベクトル空間）を定義しよう。導入は極めて一般的な形で行う。以下、可換環 A は整数 \mathbb{Z} 、実数 \mathbb{R} 、複素数 \mathbb{C} などだと置き換えて理解してもらいたい。

定義 17.1 (A -加群). A を可換環とする。集合 V が加法 $+$ を持つ群（可換群）であり、さらに任意の $c, c' \in A$ と任意の元 $\psi, \phi \in V$ について以下の性質を満たすスカラー倍演算 $A \times V \rightarrow V$ が定義されているとき、 V は A -加群であるという。ただしここで $1 \in A$ は A の乗法の単位元である

- 分配律： $(c + c')(\psi + \phi) = c\psi + c\phi + c'\psi + c'\phi$
- 複素数の乗法とスカラー倍の両立： $(cc')\psi = c(c'\psi)$
- 単位元（identity element）の存在： $1 \cdot \psi = \psi$

特に A が体 K であるとき、これを線形空間あるいはベクトル空間と呼ぶ。体 K を強調する際には、 K 線形空間や K ベクトル空間などと呼ぶ。線形代数では特に K は実数 \mathbb{R} や複素数 \mathbb{C} であった。以降も特に K が \mathbb{R} や \mathbb{C} である場合を取り扱う。

例 1： n 次以下の実数係数多項式

n 次以下の実数係数多項式 $f(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i$ は、 $A = \mathbb{R}$ として、自然に多項式の加法とスカラー倍を持つ。そのためこの空間は $n+1$ 次元のベクトル空間をなす。

次数の上限 n をなくして、任意の多項式や任意の関数についての空間を考えると、これは無限次元のベクトル空間となる。

例 2：線形写像の Im と Ker

$V_1 \rightarrow V_2$ の線形変換 f （分からなければ行列をベクトルにかけることだと思ってもらってもよい）について、 f の核 $\text{Ker } f = \{a \in V_1 \mid f(a) = 0\}$ はベクトル空間である。また、 f の像 $\text{Im } f = \{f(a) \in V_2 \mid a \in V_1\}$ もベクトル空間である。

例 3：線形斉次微分方程式の解

（定数係数とは限らない）ある線形斉次微分方程式の解全体の集合を考える。例えば

$$2 \frac{d^2}{dx^2} f(x) + x^3 \frac{d}{dx} f(x) + 4e^x f(x) = 0 \quad (17.1)$$

は線形斉次微分方程式である²⁶⁸。すると、微分方程式の線形性により、「二つの解を足したもの」及び「解を定数倍したもの」もまた、同じ微分方程式の解である。よってこれはベクトル空間である。

²⁶⁷このような公理的な視点から線形代数を記述した教科書としては、斎藤毅『線形代数の世界 抽象数学の入り口 (大学数学の入門)』東京大学出版会、などがある。

²⁶⁸線形性はあくまでも $f(x)$ に対して議論している点に注意、係数 x^3 や $4e^x$ は x について非線形な関数だが、それは関係ない。

ベクトルはこれまでは「数を並べたもの」と認識していたかもしれないが、数学的には「まず集合があり、それに（加法とスカラー倍という）演算を入れることでベクトルになる」のである。

なお、例1では数を並べたベクトルとの自然な対応関係がつけられたが、例2や例3ではそのベクトル空間がどういうものかが必ずしも分かっていない場合もある。しかしその場合でも、加法とスカラー倍で閉じていることが確認できるので、ベクトル空間の理論を問題なく適用することができる。

線形独立性、基底、次元などの定義は、これまでは数を並べたベクトルを念頭に置いて定義されていたと思うが、これらもすべて一般のベクトル空間に対して定義できる。

定義 17.2 (線形独立). K ベクトル空間 V の元 $x_1, \dots, x_m \in V$ が「線形独立 (linear independent)」であるとは、 $a_1, \dots, a_m \in K$ について

$$a_1x_1 + \dots + a_mx_m = 0 \Rightarrow a_1 = \dots = a_m = 0 \quad (17.2)$$

が成り立つことをいう。ただし左の0はベクトル空間 V の単位元、右の0は体 K の単位元である。

線形独立でない場合、その元の組は「線形従属」であるという。

定義 17.3 (基底). K ベクトル空間 V の元の組 $x_1, \dots, x_m \in V$ で、任意の元 $v \in V$ に対し

$$v = a_1x_1 + \dots + a_mx_m \quad (17.3)$$

を満たす $a_1, \dots, a_m \in K$ がただ一つだけ存在するとき、この元の組 $x_1, \dots, x_m \in V$ はこのベクトル空間の「基底 (basis)」であるという。

また、基底を構成する元の数 m を、そのベクトル空間 V の「次元 (dimension)」という²⁶⁹。

行列は線形変換として導入できるが、これはそのまま一般の K ベクトル空間に対しても拡張できる。

定義 17.4 (線形写像). K 線形空間 V, W を考える。写像 $f: V \rightarrow W$ が「線形写像 (linear mapping)」あるいは「線形変換 (linear transformation)」であるとは、以下の条件が満たされることをいう。

- 任意の $x, y \in V$ について、 $f(x + y) = f(x) + f(y)$
- 任意の $x \in V$ および任意の $a \in K$ について、 $f(ax) = af(x)$

例1: 微分

V を x を変数に持つ実係数多項式の空間とする。このとき、微分演算子 $D = \frac{d}{dx}$ は、 $V \rightarrow V$ の線形写像である

[17-1]. 複素数 \mathbb{C} を、 $x = a + bi \rightarrow \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ と2次元実ベクトル \mathbb{R}^2 で表す。このとき、ある与えられた複素数 γ をかける操作 $y = \gamma x$ は、2次元実ベクトル \mathbb{R}^2 の表現ではどのように表されるか。

17.2 内積空間

次に内積を導入しよう。以下、体 K は複素数 \mathbb{C} で考える。実数 \mathbb{R} の場合への拡張は容易である。

²⁶⁹ ここでは証明しないが、次元が well-defined であること（次元が基底によらず一意であること）は証明出来る。

定義 17.5 (内積空間). ベクトル空間において、以下の性質を満たす「二つの集合の元 $\psi, \phi \in V$ を引数に持ち、数を入力する写像 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 」が定義されているとき、集合 V は「内積空間」であるという。

- 半双線形性 (sesquilinearity) : 任意の元 $\psi, \phi, \eta \in V$ と任意の複素数 $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ に対し

$$\langle \psi, c_1\phi + c_2\eta \rangle = c_1 \langle \psi, \phi \rangle + c_2 \langle \psi, \eta \rangle \quad (17.4)$$

$$\langle c_1\psi + c_2\phi, \eta \rangle = c_1^* \langle \psi, \eta \rangle + c_2^* \langle \phi, \eta \rangle \quad (17.5)$$

ただし c^* は c の複素共役である。

- エルミート (Hermitian) 性 : 内積の二つの引数を入れ替えたものは複素共役となる

$$\{\langle \psi, \phi \rangle\}^* = \langle \phi, \psi \rangle. \quad (17.6)$$

- 正値性 (positivity) : $\phi = \psi$ のとき、

$$\langle \psi, \psi \rangle \geq 0 \quad (17.7)$$

特に等号が成り立つ元 ψ はただ一つ存在し、それはゼロベクトル 0 である。

線形代数の講義で導入されたベクトル同士の内積はもちろんこの定義を満たしている。また、これを自然に関数に拡張したものとして

$$\langle f(x), g(x) \rangle := \int dx f^*(x)g(x) \quad (17.8)$$

という内積もよく知られている。

その他の例として、以下のようなものがある。

例 1 : 重み付き内積

$-\infty < x < \infty$ 上で定義された関数 $f(x), g(x)$ の内積として

$$\langle f(x), g(x) \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} dx f^*(x)g(x)\rho(x) \quad (17.9)$$

という形のを考えよう。ただし $\rho(x)$ は重み付けを行う関数である。これは内積の公理をすべて満たしている。重み付き内積は後の章で学ぶ直交多項式の基礎にある。

例 2 : ヒルベルト・シュミット内積

正方行列 A, B に対し、以下の量

$$\langle A, B \rangle := \text{Tr}[A^\dagger B] \quad (17.10)$$

は内積の公理を満たす。これは「ヒルベルト・シュミット内積 (Hilbert-Schmidt inner product)」と呼ばれる²⁷⁰。

内積が与えられれば、これに基づいてグラム・シュミットの正規直交化法を適用することができる。グラム・シュミットの正規直交化法は、与えられた基底から正規直交基底を構成する手続きであった。これもまた、一般の内積に対してもそのまま拡張できる。

例として、重み付き内積 (17.9) で $\rho(x) = e^{-x^2}$ と選んだ

$$\langle f(x), g(x) \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} dx f^*(x)g(x)e^{-x^2} \quad (17.11)$$

²⁷⁰ これは、有限次元の行列に限らず、より一般にヒルベルト空間のヒルベルト・シュミット作用素に対して定義される。

というものを考えよう。これに対し、 $1, x, x^2, \dots$ という多項式の列に順にグラム・シュミットの正規直交法を適用していこう。そうすると、この重み付き内積の意味で互いに直交している n 次多項式 $H_n(x)$ が得られる。慣習上、ノルムを1ではなく

$$\langle H_n(x), H_n(x) \rangle = 2^n n! \sqrt{\pi} \quad (17.12)$$

と規格化すると、順に

$$H_0(x) = 1 \quad (17.13)$$

$$H_1(x) = 2x \quad (17.14)$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2 \quad (17.15)$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x \quad (17.16)$$

⋮

と多項式が得られる。これらの多項式は「エルミート多項式 (Hermite polynomial)」という。エルミート多項式は、量子力学の調和振動子 (量子版のばね) を解く際に出てくるものであり、後の直交多項式の章で詳しく議論する。

17.3 スペクトル定理

一般のベクトル空間から自身への線形写像 $A: V \rightarrow V$ に対しても、固有値や固有ベクトルに相当する概念を定義できる。線形変換 A について、 $\lambda \in K$ の「固有空間 (eigenspace)」を

$$V_\lambda := \{x | (A - \lambda I)x = 0\} \quad (17.17)$$

で定義する。ただし I は恒等変換である。固有空間は部分ベクトル空間である。またこの一般化として、

$$\tilde{V}_\lambda := \{x | (A - \lambda I)^m x = 0, \exists m > 0\} \quad (17.18)$$

という空間を考えることも出来る。これは「一般化固有空間」と呼ばれる。

すると、有限次元ベクトル空間で K が代数的に閉じている場合、一般化固有空間全体の直和で、元のベクトル空間は記述できる。これは定理 2.7 のスペクトル定理の一般化であり、証明も定理 2.7 と同様にして示せる。

定理 17.1 (スペクトル定理 (spectral theorem)). 任意の $V \rightarrow V$ の線形写像 A について、 A の一般化固有空間たちの直和は V と一致する。つまり

$$V = \tilde{V}_{\lambda_1} \oplus \tilde{V}_{\lambda_2} \oplus \tilde{V}_{\lambda_3} \oplus \dots \quad (17.19)$$

これがジョルダン標準形を与えることはすでに見た。ここでは、このジョルダン標準形が、定数係数線形齊次微分方程式の一般解と関係していることを見よう。

定数係数線形齊次微分方程式

$$a_n \frac{d^n}{dx^n} f(x) + a_{n-1} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} f(x) + \dots + a_1 \frac{d}{dx} f(x) + a_0 f(x) = 0 \quad (17.20)$$

の一般解は、対応する n 次方程式が

$$a_n t^n + a_{n-1} t^{n-1} + a_1 t + a_0 = \prod_{i=1}^k (t - \lambda_k)^{n_k} \quad (17.21)$$

と因数分解される (解 λ_k が n_k 重解である) とき、これを用いて

$$f(x) = \sum_{i=1}^k e^{\lambda_k x} (c_{k,n_k-1} x^{n_k-1} + c_{k,n_k-2} x^{n_k-2} + \cdots + c_{k,1} x + c_0) \quad (17.22)$$

と書けることが知られている (気になる人は代入して確認してみよう)。そして実は、これはスペクトル定理と対応している。

既にみたように、(定数係数) 線形斉次微分方程式の解全体はベクトル空間をなす。これを V とする。すると、微分演算子 $D := \frac{d}{dt}$ は、 $V \rightarrow V$ の線形写像を与える²⁷¹。そのため、 D に対するスペクトル定理を考えることにより、解の空間は

$$\left(\frac{d}{dt} - \lambda_i \right)^m f(x) = 0 \quad (17.23)$$

の形で書ける解の線形結合で与えられることが分かる。さらに、ジョルダンブロック (2.35) について、変換 $X^{[i,i]} - \lambda_i I$ は

$$e_n \rightarrow e_{n-1} \rightarrow \cdots \rightarrow e_1 \rightarrow 0 \quad (17.24)$$

という変換をその空間の自然な基底に対して与えるが、このジョルダン標準形の構造をなぞるように、 $\left(\frac{d}{dt} - \lambda_i \right)$ の作用は

$$\frac{1}{n!} x^n e^{\lambda_i x} \rightarrow \frac{1}{(n-1)!} x^{n-1} e^{\lambda_i x} \rightarrow \cdots \rightarrow \frac{1}{2} x^2 e^{\lambda_i x} \rightarrow x e^{\lambda_i x} \rightarrow e^{\lambda_i x} \rightarrow 0 \quad (17.25)$$

と関数を変化させていく。つまり、これらが解の空間の基底を与える。特に $\frac{1}{m!} x^m e^{\lambda_i x}$ は $m+1$ 階の一般化固有状態に相当する。

17.4 固有値問題とスツルム・リウヴィル型問題

線形代数では、与えられた行列 A に対する固有値方程式

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \quad (17.26)$$

を解く問題に数多く直面した。特に A が半正定値エルミート行列ならば、固有値方程式を満たす λ は常に正の実数である。これを一般化して、微分方程式の場合で考えよう。

非負の重み $\rho(x)$ を付けた重み付き内積 (17.9) の下で、演算子 L として

$$Lf(x) = \frac{1}{\rho(x)} \left(\frac{d}{dx} p(x) \frac{d}{dx} - q(x) \right) f(x) \quad (17.27)$$

というものを考える。この演算子は、適切な積分範囲と境界条件²⁷² が設定されているという仮定の下で、

$$\langle g, Lf \rangle = \int dx g^*(x) \left(\frac{d}{dx} p(x) \frac{d}{dx} - q(x) \right) f(x) = \int dx \left(-\frac{dg^*(x)}{dx} \frac{df(x)}{dx} p(x) - g^*(x) f(x) q(x) \right) \quad (17.28)$$

と計算できる。特に $p(x), q(x)$ が非負ならば、右辺を見ることにより、

$$\langle f, Lf \rangle \leq 0 \quad (17.29)$$

と分かる。つまり、 $-L$ は半正定値 (L は半負定値) の演算子である。

以上を踏まえて、固有値方程式の一般化の一種である、スツルム・リウヴィルの固有値問題を導入する²⁷³。

²⁷¹ これは定数係数の場合のみの性質である

²⁷² 積分の境界で関数がゼロになる or 周期境界で値が一致する、などの条件が課されていて、部分積分を実行した際に境界項はゼロになるということ。

²⁷³ 見やすくするために、両辺に $\rho(x)$ をかけて書くのが一般的である。

定義 17.6 (スツルム・リウヴィルの固有値問題 (Sturm-Liouville problem)). $p(x), q(x), \rho(x)$ は与えられた非負関数とする。このとき、以下の微分方程式

$$\rho(x)Lf(x) = \left(\frac{d}{dx}p(x)\frac{d}{dx} - q(x) \right) f(x) = -\lambda\rho(x)f(x) \quad (17.30)$$

を満たすような、適切な境界条件²⁷⁴を満たす $f(x)$ と λ を求めよ、という問題を「スツルム・リウヴィルの固有値問題」という。

既に行った考察により、以下のことが分かる。

- λ は非負の実数である
- 規格化された固有関数は正規直交基底をなす。

また、より詳しい考察により、以下のことが分かっている。

- λ には上限はない
- 下から n 番目の固有値 λ_n に対応する固有関数 $f_n(x)$ は、ゼロ点を $n - 1$ 個持つ。

特殊関数で出会う微分方程式の多くはスツルム・リウヴィル型微分方程式なので、このように一般論があらかじめわかっているのは便利である。

17.5 <補論>：代数

線形空間を導入する前に、群、環、体を簡単に導入しておこう。線形空間論の理解には必ずしも必要はない（以降の線形空間の例はすべて整数、実数、複素数を用いるので）が、群や体は物理でもよく登場するものなので、それを知っておくという意味も込めてここで紹介する。分からなければ、次の節まで飛ばしても構わない。

定義 17.7 (群). 集合 S と集合上の演算 $\circ (S \times S \rightarrow S)$ が、

- 結合法則 $a \circ (b \circ c) = (a \circ b) \circ c$ を満たす
- $a \circ e = e \circ a = a$ を満たす単位元 e が存在する
- 任意の元 a に対し、 $a \circ a^{-1} = a^{-1} \circ a = e$ を満たす逆元 a^{-1} が存在する

とき、この代数系を「群 (group)」という。

さらに、交換法則 ($a \circ b = b \circ a$) を満たすとき、その群は「可換群 (commutative group)」「加法群 (additive group)」「アーベル群 (Abelian group)」などと呼ばれる。

抽象的な定義を見ていてもよく分からないと思うので、具体例をいくつか見よう。

例 1：巡回群 \mathbb{Z}_n

自然数 n を一つ固定する。集合は $\{0, 1, \dots, n - 1\}$ 。演算は n で割った余りについての足し算。

²⁷⁴積分区間を $[a, b]$ とすると、 θ_1, θ_2 を固定したうえで

$$\cos \theta_1 f(a) + \sin \theta_1 f'(a) = 0 \quad (17.31)$$

$$\cos \theta_2 f(b) + \sin \theta_2 f'(b) = 0 \quad (17.32)$$

という形の境界条件を課す。 $\theta = 0$ は $f(x) = 0$ を意味し、これは「ディリクレ境界条件 (Dirichlet boundary condition)」という。 $\theta = \frac{\pi}{2}$ は $f'(x) = 0$ を意味し、これは「ノイマン境界条件 (Neumann boundary condition)」という。

例 2：対称群 S_n

自然数 n を一つ固定する。集合は n 個の要素の置換全体。

ちなみに、置換の偶奇の性質により、偶置換全体も群をなす。これは「交代群 A_n 」と呼ばれる。

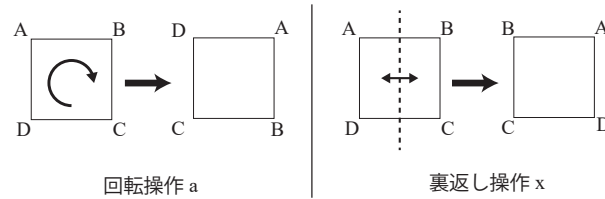


図 43: 二面体群 D_8 の二つの操作、90 度回転 a と縦軸を対象軸とした裏返し x 。

例 3：二面体群 (dihedral group) D_{2n}

集合は、正 n 角形の板に回転、または裏返しをほどこし、元と同じ形で重なるように写すような変換の集合。演算は、この変換を連続的に作用させて得られる変換。

例えば D_8 は、正方形に対し、「回転」及び「縦方向を軸に裏返し」の操作を施して得られる変換全体の集合からなる (図 43 参照)。特に「時計回り 90 度回転をする操作 a 」と「縦方向を軸に裏返しする操作 x 」の二つの元だけで、可能な操作はすべて書くことが出来る。何も変化させない操作を特に e と書くことにすると、 $a^4 = x^2 = e$ が満たされる。

例 4：剰余類の乗法群

自然数 n を固定する。集合は、 $\{1, \dots, n-1\}$ のうち、 n と互いに素なもの全体。演算は、二つの積を n で割った余り。これを \mathbb{Z}_n^* と書く。

例えば $n = 12$ の場合、集合は $\{1, 5, 7, 11\}$ からなり、 $5 \circ 7 = 11$ のようになる。

上記の例のうち、例 1 と例 4 は可換、例 2 と 3 は一般に非可換である。

ここまで見た例は、すべて要素が有限個の有限群であった。要素が無制限個ある例もいくつか見ておこう。

例 1：加法

集合は整数 \mathbb{Z} または実数 \mathbb{R} 。演算は通常の加法 $+$ 。

例 2：行列の積

集合は $n \times n$ の実行列で、行列式がゼロでないもの全体。演算は通常の行列の積。

例 3：3 次元の回転群

集合は 3×3 の実直交行列で、行列式が 1 であるもの全体。演算は通常の行列の積。これを $SO(3)$ と書く²⁷⁵。

$SO(3)$ は「空間の回転を与える行列」である。以下の行列

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{17.33}$$

は z 軸周り θ 回転を与えるものだが、 xyz 全ての軸で自由に回転させて、それをつないで作れる行列たちが $SO(3)$ をなす。

例 4：2 次元のユニタリ群

集合は 2×2 のユニタリ行列で、行列式が 1 であるもの全体。演算は通常の行列の積。これを $SU(2)$ と書く。

群では集合上に一種類の演算が定義されていたが、二種類の演算が定義されている代数系もある。

²⁷⁵SO は special orthogonal の頭文字で、行列式が 1 であることを「特殊 (special)」と呼んでいる。

定義 17.8 (環). 加法演算 $+$ の可換群の上に、さらに別の乗法演算 $\cdot (S \times S \rightarrow S)$ が定義されており、任意の $a, b, c \in S$ について

- 乗法の結合法則 $a \cdot (b \cdot c) = (a \cdot b) \cdot c$ を満たす
- 乗法の単位元 ($a \cdot e' = e' \cdot a = a$ を満たす e') が存在する
- 加法と乗法について分配法則 ($a \cdot (b + c) = a \cdot b + a \cdot c$, $(a + b) \cdot c = a \cdot c + b \cdot c$) を満たす

が成り立つとき、この代数系を「環 (ring)」という。

定義 17.9 (体). ある環が、さらに乗法について

- e (加法の単位元) 以外の任意の元 $a \in S$ に対し、乗法の逆元 ($a \cdot a^{-1} = a^{-1} \cdot a = e'$ を満たす a^{-1}) が存在する

を満たすとき、この代数系を「体 (field)」という。

例 1: 足し算と掛け算

集合として自然数 \mathbb{Z} または実数 \mathbb{R} をとり、通常の足し算及び掛け算を演算として選べば、これは体である。

例 2: 行列

集合として $n \times n$ 行列全体をとり、行列の足し算と掛け算をそれぞれ $+$ と \cdot の定義とすれば、これは環である。この場合、加法の単位元はゼロ行列 O 、乗法の単位元は単位行列 E である。

例 3: p 元体

p を素数とする。集合として $\{0, 1, \dots, p-1\}$ をとる。加法と乗法として、それぞれ p で割った余りの意味での足し算と掛け算を選ぶ。するとこの代数系は体である。(加法の単位元は 0 、乗法の単位元は 1) この体を「 p 元体」と呼び F_p と書く。

例 4: 多項式環

可換環 A が与えられたとする。(例えば A は整数 \mathbb{Z} や実数 \mathbb{R} などである)

A の元を係数に持つ未知変数 x の多項式 $\sum_{n=0}^N a_n x^n$ ($a_n \in A$) 全体の集合を考え、加法と乗法を通常のも項式の足し算と掛け算とすると、これは環となる。

ちなみに、多項式の割り算とその余りの計算を用いると、例えば「多項式を $5x^3 - 3x^2 + 2x - 4$ で割った余りの多項式 (加法と乗法は通常のも項式の足し算と掛け算の余りとする)」というものを考えることができる。これもまた環となる。この例の場合、集合は 2 次以下の多項式全体の集合である。

例 5: 拡大体

有理数全体の集合 \mathbb{Q} に、新しい文字 X を追加し、 $a + bX$ ($a, b \in \mathbb{Q}$) と書かれる式全体の集合を考える。ただし X は $X^2 = 3$ という関係式を満たすものとする。通常のも足し算と掛け算を加法と乗法とすると、これは体となる。

X の性質から明らかなように、これは $a + b\sqrt{3}$ と書ける数全体の集合である。これを有理数体の拡大体と呼び、 $\mathbb{Q}(\sqrt{3})$ と書く。

代数の分野では、群などの公理を出発点にして、その公理を満たす任意の代数系が満たす性質を導出した、り、ありうる群としてどういうものがあるのかを解明したりしている。例えば、それ以上素因数分解できない数を「素数」というように、群においても、ある種「分解できないもの (=単純なもの)」を定義することができる。有限群の単純群は、完全なリストが得られている²⁷⁶。また、「5 次以上の方程式には、四則演

²⁷⁶ これは 20 世紀代数分野の最大の成果と言われている。

算と n 乗根だけでは表せない解を持つものがある」という有名な定理（アーベルの定理）があるが、これは拡大体の理論を用いて証明される²⁷⁷。

²⁷⁷むしろ歴史的には、この問題を取り扱うために群論や体論は発展した。

18 フーリエ級数

フーリエ級数展開は、基本的な考え方は「振動・波動論」ですでに習っている（あるいは自習している）はずである。また厳密な取り扱いやフーリエ級数の代表的応用である微分方程式の解き方は、「実解析学」や「偏微分方程式論」の講義で習うはずである。そうした講義と同じ内容をこの講義で扱ってもあまり意味はないので、ここでは簡単な復習をしたあとは、フーリエ変換の発展や様々な応用を詳しく見ることにする。

18.1 フーリエ級数展開の考え方

フーリエ級数展開でやりたいことは「周期関数を、周期関数の代表格である三角関数の和の形で表そう」というものである。フーリエ級数展開でカギになるのは、自然数 n, m に対して成り立つ以下の関係式である²⁷⁸。

$$\int_0^{2\pi} dx \sin(nx) \sin(mx) = \begin{cases} 0 & : n \neq m \\ \pi & : n = m \end{cases} \quad (18.1)$$

$$\int_0^{2\pi} dx \cos(nx) \cos(mx) = \begin{cases} 0 & : n \neq m \\ \pi & : n = m \end{cases} \quad (18.2)$$

$$\int_0^{2\pi} dx \sin(nx) \cos(mx) = 0 \quad (18.3)$$

イメージとしては、三角関数の振動数がずれていると、途中で正負が互いに打ち消し合って積分がゼロになってしまう、という風に理解しておけばいい。

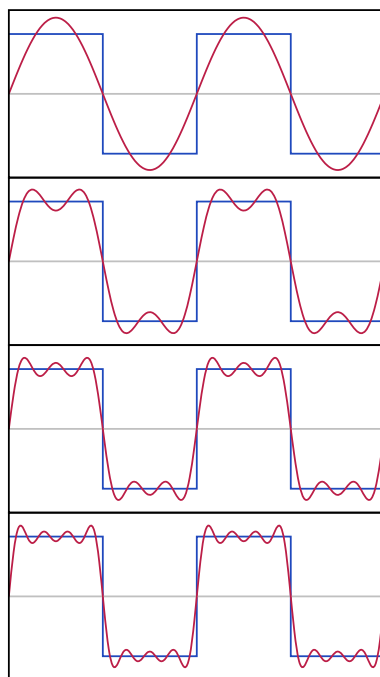


図 44: 方形波関数に対するフーリエ級数の例。適切な三角関数を足し合わせていくことで、方形波関数に近づいていく様子が見れる。画像は Wikipedia 「フーリエ級数」 より引用。

²⁷⁸積和の公式を用いて変形すれば、これらの結果は簡単に示せる。

この関係があるため、もし $f(x)$ が区間 $0 \leq x \leq 2\pi$ 上の関数であり、

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin nx + \sum_{n=0}^{\infty} b_n \cos nx \quad (18.4)$$

と書けていたとすると、

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} dx f(x) \sin nx \quad (18.5)$$

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} dx f(x) \cos nx \quad (n \geq 1) \quad (18.6)$$

$$b_0 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx f(x) \quad (n = 0) \quad (18.7)$$

と、係数を $f(x)$ から簡単に求めることが出来る。そのため逆に、一般の区間 $0 \leq x \leq 2\pi$ 上の関数 $f(x)$ に対しても、式 (18.5)、(18.6) で係数を決めて、関数 f は式 (18.4) 右辺のように展開できるだろうと考えるのは自然である。これを実行したのがフーリエ展開であり、その際の式 (18.4) 右辺をフーリエ級数という。フーリエ級数展開が何をしているのかは、方形波に対する図 44 などを見ると理解しやすいだろう²⁷⁹。

一般の場合に式 (18.4) 右辺が本当に左辺 $f(x)$ に収束するかはきちんとした議論が必要であり、数学的には高度な技術を要する部分もあるが、(物理の文脈で出会う) ほとんどのまともな関数では、フーリエ級数は元の関数に収束する (収束に関するデリケートな話題は補論の 18.7 節で扱う)。

三角関数はオイラーの公式 $e^{\pm i\theta} = \cos \theta \pm i \sin \theta$ で指数関数に結び付けられるので、三角関数の代わりに指数関数を用いることが多い。この場合は

$$f(x) = \sum_n c_n e^{inx} \quad (18.8)$$

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx f(x) e^{-inx} \quad (18.9)$$

とフーリエ級数展開される。この場合は $n \in \mathbb{Z}$ が波数である。フーリエ係数 c_n は \hat{f}_n などと、元の関数にハット記号 $\hat{\cdot}$ を付けて表すことも多い。この講義では、以下では指数関数を用いたフーリエ変換の方を用いていく。

このフーリエ級数展開では、「有限区間の連続関数」が「加算無限個の点上の関数 (数列)」へと変換された。なので逆に、加算無限個の点上の関数 $f(x)$ ($x \in \mathbb{Z}$) が与えられた際には、それをフーリエ変換すると

$$\hat{f}(k) = \sum_x f(x) e^{-ikx} \quad (18.10)$$

となり²⁸⁰、 $-\pi < k \leq \pi$ 上の有限区間の連続関数が得られる。この場合のフーリエ逆変換は

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx \hat{f}(k) e^{ikx} \quad (18.11)$$

である。

関数 $f(x)$ が整数ではなく分母 a の有理数 ($x = n/a$, $n \in \mathbb{Z}$) 上で定義されている場合には、フーリエ変換は式 (18.10) と同じ変換 (ただし x は取りうる値すべてを走る) で定義される。これにより得られる関数 $\hat{f}(k)$ は $-\pi < k \leq \pi$ 上の関数である。

ここから、無限区間 $-\infty < x < \infty$ 上の関数 $f(x)$ のフーリエ変換を行う場合には、 $a \rightarrow \infty$ の状況を考え

²⁷⁹ただし方形波のように不連続な関数の場合、フーリエ級数展開して得られる関数は、元の方形波の関数に各点収束はするが一樣収束せず、端に 1 割ほどの出っ張りが残り続けることが知られている。これは「ギブズ現象」と呼ばれており、詳しくは 18.7 節で扱う。

²⁸⁰ $1/2\pi$ の因子を含めても構わない (その場合は逆変換の式の因子も修正する)。当然ながらどちらで定義しても特に本質的な差異があるわけではない。以下同。

ればよいだろうと考えられる²⁸¹。このときは、フーリエ変換と逆変換は

$$\hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-ikx} \quad (18.12)$$

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \hat{f}(k) e^{ikx} \quad (18.13)$$

で定義される。 $f(k)$ は実数 $(-\infty < k < \infty)$ 上の関数である。

$f(\mathbf{x})$ が d 次元空間から実数への関数の場合も、フーリエ変換は同様に定義される。 $f(\mathbf{x})$ が、各 i について $-\pi \leq x_i \leq \pi$ を満たす \mathbf{x} の上²⁸² で定義されている場合には、

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{n}} \hat{f}_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{n} \cdot \mathbf{x}} \quad (18.14)$$

$$\hat{f}_{\mathbf{n}} = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^d \int_{-\pi}^{\pi} dx_1 \cdots \int_{-\pi}^{\pi} dx_d f(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{n} \cdot \mathbf{x}} \quad (18.15)$$

で定義される。ただし $\mathbf{n} \cdot \mathbf{x}$ は通常の内積である。

逆に $f(\mathbf{x})$ が d 次元空間の格子点上で定義されている場合には、フーリエ変換と逆変換は

$$\hat{f}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (18.16)$$

$$f(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^d \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \cdots \int_{-\pi}^{\pi} dk_d \hat{f}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (18.17)$$

で定義できる。

$f(\mathbf{x})$ が、無限区間 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ 上で定義されている場合には、フーリエ変換と逆変換は

$$\hat{f}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{x} f(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (18.18)$$

$$f(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^d \int d\mathbf{k} \hat{f}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (18.19)$$

で定義できる。

18.2 連続および離散フーリエ級数の性質

$[-\pi, \pi]$ の区間上の関数の空間を考える。この区間上の (適切な) 関数の空間²⁸³ の基底として $e_n(x) = e^{inx}$ というものがとれる。ここで、内積として

$$\langle f, g \rangle := \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx f^*(x) g(x) \quad (18.20)$$

というものを考える。すると、展開係数

$$\hat{f}_m := \langle e_m, f \rangle \quad (18.21)$$

を用いて、フーリエ級数展開は

$$f(x) = \sum_n \hat{f}_n e_n(x) \quad (18.22)$$

という一般的な形で表せる。

上記の構造は、内積が式 (18.20) の形で書けるなら、必要に応じて和を積分にする (あるいはその逆) ことにより、容易に他の関数の空間に拡張できる。ここまでは連続空間 \mathbb{R} 上のフーリエ変換を考えていたが、

²⁸¹ 数学的には、収束性などで気にすべき点は増えて難しくなるが、ここではそういう数学的に厳密な視点は脇に置いて話を進める。

²⁸² つまり原点を中心とする一辺 2π の超立方体の内部である

²⁸³ 任意の関数がフーリエ展開できるわけではないので、関数の空間を適切に制限する必要がある。

ここでは $\mathbb{Z}_2^{\otimes n} \rightarrow \mathbb{R}$ のブール関数²⁸⁴ (Boolean function) を考えよう²⁸⁵。 \mathbb{Z}_2 は「2で割った余りの足し算」あるいは「 ± 1 の掛け算」と同一視できる。要素は、前者ならば $\{0, 1\}$ 、後者ならば $\{\pm 1\}$ である。二つの記法は、便利な方を用いよう。

以下しばらく $\{\pm 1\}$ の記法を用いる。ブール関数の重要な性質に、任意の関数が多項式で表示できる、というものがある。例えば、2変数のブール関数で

$$f(x_1, x_2) = \max(x_1, x_2) \quad (18.23)$$

というものを考えよう。この関数は一見すると多項式的ではないが、実は

$$\max(x_1, x_2) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{2}x_2 - \frac{1}{2}x_1x_2 \quad (18.24)$$

と多項式で表せる。これはこの例に限らず一般に成り立つ性質である。このことを理解するには、 $a_1, \dots, a_n \in \{\pm 1\}$ に対する指示多項式 ($\mathbf{x} = \mathbf{a}$ のときに限り 1、他の場合にはゼロをとる関数) が

$$1_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}) = \left(\frac{1+a_1x_1}{2}\right) \left(\frac{1+a_2x_2}{2}\right) \cdots \left(\frac{1+a_nx_n}{2}\right) \quad (18.25)$$

と書けることを利用するとよい。これが指示関数であることは、 $(1+ax)/2$ は $a=x$ のとき 1、それ以外 ($a=-x$) のとき 0 となることから明らかである。この表示を用いると、任意のブール関数 $f(\mathbf{x})$ は

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{a} \in \{\pm 1\}^n} f(\mathbf{a}) 1_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}) \quad (18.26)$$

と展開できる。よって任意のブール関数は多項式表示を持つ。

さて、 $x_i^2 = 1$ であることから、各 x_i は 1 次の項までしか現れない。よって多項式のありうる項は、各 x_i が 0 個または 1 個出現するので、 n 変数ならば 2^n 個の項が現れる²⁸⁶。 $\{1, 2, \dots, n\}$ の部分集合 $S \subset \{1, \dots, n\}$ に対し、 x^S で

$$x^S := \prod_{i \in S} x_i \quad (18.27)$$

を表すことにする。 x^S たちは、 n 変数ブール関数の空間の基底をなす。これを用いて、ブール関数 f のフーリエ変換とブール関数の空間の内積を以下のように定義する。

定義 18.1 (ブール関数のフーリエ変換). $\{\pm 1\}^n \rightarrow \mathbb{R}$ のブール関数 $f(\mathbf{x})$ のフーリエ変換を以下で定義する。

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{S \subset \{1, \dots, n\}} \hat{f}_S x^S \quad (18.28)$$

$\hat{f}_S \in \mathbb{R}$ がフーリエ係数である。

定義 18.2 (ブール関数の内積). $\{\pm 1\}^n \rightarrow \mathbb{R}$ のブール関数 $f(\mathbf{x}), g(\mathbf{x})$ の内積を以下で定義する。

$$\langle f, g \rangle := \frac{1}{2^n} \sum_{\mathbf{x} \in \{\pm 1\}^n} f(\mathbf{x})g(\mathbf{x}) \quad (18.29)$$

この定義が内積の公理を満たすことは容易に確認できる。すると、ブール関数のフーリエ係数は、実数に対するフーリエ変換と全く同様の形で、内積を用いて簡単に計算できることが分かる。

²⁸⁴ブール関数といった場合には、値域を \mathbb{R} ではなく \mathbb{Z}_2 にとる場合も多い。

²⁸⁵この節及び 18.6 節の内容は、R. O'Donnell, *Analysis of Boolean functions*, Cambridge university press を参照した

²⁸⁶この項数は、ありうる入力の場合の数 2^n 通りと一致している。

定理 18.1. x^S のフーリエ係数 \hat{f}_S は、以下で求まる。

$$\hat{f}_S = \langle x^S, f \rangle \quad (18.30)$$

[18-1]. この定理を示せ。

[18-2]. $\max(x_1, x_2, x_3)$ をフーリエ級数展開せよ。

内積とフーリエ級数に関して成り立つ、プランシャールの定理を示しておこう。以下の証明から明らかのように、これは連続・離散を問わず、またそれ以外の場合にも一般の正規直交基底を用いた関数の展開に関して成り立つ結果である。

定理 18.2 (プランシャールの定理 (Plancherel's theorem)). $f(x) = \sum_n \hat{f}_n e_n(x)$ というフーリエ級数展開がなされているとする。ただし e_n は内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ の下での正規直交基底である。このとき、以下が成り立つ

$$\langle f, g \rangle = \sum_n \hat{f}_n^* \hat{g}_n \quad (18.31)$$

証明.

$$\langle f, g \rangle = \left\langle \sum_n \hat{f}_n e_n(x), \sum_m \hat{g}_m e_m(x) \right\rangle = \sum_{n,m} \hat{f}_n^* \hat{g}_m \langle e_n(x), e_m(x) \rangle = \sum_n \hat{f}_n^* \hat{g}_n \quad (18.32)$$

から従う。 □

特に $f = g$ の場合の関係式

$$\langle f, f \rangle = \sum_n |\hat{f}_n|^2 \quad (18.33)$$

は「パーセヴァルの等式 (Parseval's identity)」と呼ばれる。

また別の重要なフーリエ変換の性質を見るために、まず関数の「畳み込み」を定義しよう。

定義 18.3 (畳み込み (convolution)). 関数 f と g の「畳み込み $f * g(x)$ 」とは

$$f * g(x) = \int dy f(y) g(x - y) \quad (18.34)$$

で与えられる関数のことである。

離散値を取る場合は、右辺の積分は和に置き換えられる。

関数 $f * g(x)$ のフーリエ係数を $\widehat{f * g}(k)$ と書くことにする。以下の定理は、 $\widehat{f * g}(k)$ は \hat{f} 、 \hat{g} を用いて極めて簡潔に書くことが出来ることを示している。

定理 18.3 (畳み込み定理 (convolution theorem)). フーリエ変換の基底 $e_n(x)$ は $e_n(x+y) = e_n(x)e_n(y)$ を満たすとする。また内積は式 (18.20) の形とする。

このとき関数 $f * g(x)$ のフーリエ変換 $\widehat{(f * g)}_n$ は、以下のようにあらわせる。

$$\widehat{(f * g)}_n = \hat{f}_n \hat{g}_n \quad (18.35)$$

証明. 直接計算により、以下のようにして欲しい関係式が得られる。

$$\begin{aligned}
 (\widehat{f * g})_n &= \int dx e_n^*(x) \int dy f(y) g(x-y) \\
 &= \int ds \int dt e_n^*(s+t) f(s) g(t) \\
 &= \int ds \int dt e_n^*(s) e_n^*(t) \sum_m \hat{f}_m e_m(s) \sum_l \hat{g}_l e_l(t) \\
 &= \sum_{m,l} \hat{f}_m \hat{g}_l \delta_{mn} \delta_{ln} \\
 &= \hat{f}_n \hat{g}_n
 \end{aligned}
 \tag{18.36}$$

□

証明からも明らかなように、畳み込み定理も離散・連続フーリエ変換問わず成り立つ定理である。

18.3 デルタ関数とフーリエ変換

この節では、計算を進める上では非常に便利な、デルタ関数の取り扱いについて、数学的にはあまり厳密ではない形で議論する。デルタ関数 $\delta(x)$ は、任意の関数 $g(x)$ と $\varepsilon > 0$ に対し

$$\delta(x) = 0 \quad (x \neq 0) \tag{18.37}$$

$$\int_{0-\varepsilon}^{0+\varepsilon} dx g(x) \delta(x) = g(0) \tag{18.38}$$

を満たす関数である (図 45)。イメージ的には、一点 $x = 0$ で無限大の値を、他の場所ではすべて 0 をとって、積分すると 1 になるような関数である。これは通常の意味での関数ではないが、超関数 (generalized function) 論の枠組では正當に取り扱うことができる。あるいは、量子力学では「ゲルファントの三つ組」という枠組で取り扱うことができる²⁸⁷。ここでは細かい点は気にせずに、デルタ関数を通常関数のようにとらえて議論を進める。

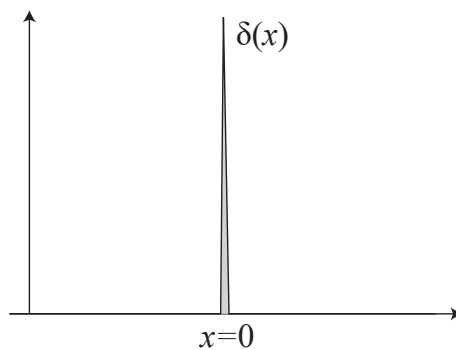


図 45: デルタ関数 $y = \delta(x)$ のイメージ図。点 $x = 0$ に、無限に細く無限に高いピークが立っている。グレーの領域の面積は 1 になるように、細さと高さの関係を保ちながら、幅をゼロ、高さを無限大に飛ばしている。

²⁸⁷大変大雑把にいうと、これらの枠組は、デルタ関数のような「激しい関数」と、非常に滑らかな関数のような「行儀のよい関数」の積の積分のみを考えるのであれば、「激しい関数」も妥當な形で取り扱える、というものである。

極限をとるとデルタ関数が得られる関数列は色々知られている。例えば

$$f_n(x) := \begin{cases} n & |x| \leq \frac{1}{2n} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (18.39)$$

$$g_n(x) := \frac{\sin nx}{\pi x} \quad (18.40)$$

$$h_n(x) := \sqrt{\frac{n}{\pi}} e^{-nx^2} \quad (18.41)$$

はすべて $n \rightarrow \infty$ でデルタ関数に収束する。

デルタ関数は、引数がゼロになる場所での「速度」も重要である。例えば

$$\int_{0-\varepsilon}^{0+\varepsilon} dx g(x) \delta(ax) = \int_{0-\varepsilon/a}^{0+\varepsilon/a} dy \frac{1}{a} g\left(\frac{y}{a}\right) \delta(y) = \frac{1}{|a|} g(0) \quad (18.42)$$

なので、

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x) \quad (18.43)$$

という関係式が成り立つ。 $x = 0$ を通過する「速度」が ax だと a 倍になっているので、積分して得られる値が $\frac{1}{a}$ 倍になってしまう、というイメージである。 a が負の場合は積分範囲が負から正の方向になるので、符号が打ち消し合う。

[18-3]. $a > 0$ に対し、以下の関係を示せ。

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2a} (\delta(x - a) + \delta(x + a)) \quad (18.44)$$

デルタ関数のフーリエ変換は、直接計算すると

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ikx} \quad (18.45)$$

と分かる。ただし k は適切な範囲²⁸⁸ の積分または和である。これは、フーリエ変換の逆変換の式

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{-ikt} \int ds f(s) e^{iks} = \frac{1}{2\pi} \int ds f(s) \int dk e^{ik(s-t)} \quad (18.46)$$

からも見て取ることができる関係式である。

18.4 応用：ランダムウォーク再帰時間

ここでは、以下の問題を考えよう。

問題： d 次元の格子上のランダムウォークを考える。ランダムウォークのルールとして、 $2d$ 個の隣接頂点にそれぞれ確率 $1/2d$ で移動するというものを考える。このとき、最初にいた頂点に確率 1 で戻ってくるか否かを、次元 $d = 1, 2, 3$ に対し求めよ。

このマルコフ過程を与える確率行列を T とする。

初期位置を原点とし、その際の n ステップ後の分布を $P_n(x)$ とする。このとき、 n ステップ後に原点に戻ってくる確率は

$$P_n(\mathbf{0}) = (T^n)_{\mathbf{0},\mathbf{0}} \quad (18.47)$$

で与えられる。ただし $(T^n)_{\mathbf{0},\mathbf{0}}$ は、行列 T^n の $(\mathbf{0}, \mathbf{0})$ 成分²⁸⁹ のことである。

²⁸⁸ 周期境界条件の有限区間の場合には、 k は離散的である。

²⁸⁹ 行列の各行および各列はそれぞれ「格子上の取りうるサイト」に対応している。

このランダムウォークで原点を訪れる回数の期待値は

$$E = \sum_{n=1}^{\infty} P_n(\mathbf{0}) \quad (18.48)$$

と書ける。さて、もし原点に戻ってくる確率が1であれば、 E は発散する。逆に、もし原点に戻ってくる確率が1未満であれば、 E は有限の値にとどまる²⁹⁰。よって、 E が発散するかしないかを調べれば、原点に戻る確率が1かそれ未満かを明らかにできる。

ランダムウォークの並進対称性より、 $T_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'} = f(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ と、移動距離のみに依存する関数の形で表せる。 m ステップ目にいるサイトを \mathbf{x}_m と表すことにすると、 n ステップ後にいるサイトが \mathbf{z} である確率は

$$\begin{aligned} P_n(\mathbf{z}) &= (T^n)_{\mathbf{z}, \mathbf{0}} = \sum_{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{n-1}} T_{\mathbf{z}, \mathbf{x}_{n-1}} T_{\mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{x}_{n-2}} \cdots T_{\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1} T_{\mathbf{x}_1, \mathbf{0}} \\ &= \sum_{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{n-1}} f(\mathbf{z} - \mathbf{x}_{n-1}) f(\mathbf{x}_{n-1} - \mathbf{x}_{n-2}) \cdots f(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) f(\mathbf{x}_1 - \mathbf{0}) \end{aligned} \quad (18.49)$$

である。式(18.49)右辺は、畳み込みの繰り返し $f * f * \cdots * f * f(\mathbf{z})$ の形そのものをしてしている。ここでフーリエ変換を行うと、畳み込みの定理により

$$P_n(\mathbf{z}) = f * \cdots * f(\mathbf{z}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} d\mathbf{k} \widehat{f * \cdots * f}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{z}} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} d\mathbf{k} (\hat{f}(\mathbf{k}))^n e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{z}} \quad (18.50)$$

と計算できる。我々が計算したい E は、特に $\mathbf{z} = \mathbf{0}$ の場合に相当するので、

$$E = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} d\mathbf{k} (\hat{f}(\mathbf{k}))^n = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} d\mathbf{k} \sum_{n=1}^{\infty} (\hat{f}(\mathbf{k}))^n = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} d\mathbf{k} \frac{1}{1 - \hat{f}(\mathbf{k})} \quad (18.51)$$

が発散するか有限にとどまるかが分かればよい²⁹¹。

この量は $\hat{f}(\mathbf{k})$ という、一つの f についてのフーリエ級数で書けているので、評価は簡単である。まず一次元($d=1$)の場合から考えよう。この場合、 $f(z)$ は

$$f(z) = \begin{cases} \frac{1}{2} & z = \pm 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (18.52)$$

なので、

$$\hat{f}(k) = \cos k \quad (18.53)$$

である。このときの積分は、 $\cos k \geq 1 - k^2/2$ より

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{1 - \cos k} \geq \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{1 - (1 - k^2/2)} = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{2dk}{k^2} \quad (18.54)$$

であり、これは $k=0$ 近傍の積分の寄与が $1/k$ で発散することを示す。よって、一次元の場合には E は発散し、ランダムウォークは確率1で原点に回帰する。

二次元($d=2$)の場合には、

$$f(\mathbf{z}) = \begin{cases} \frac{1}{4} & \mathbf{z} = \begin{pmatrix} \pm 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (18.55)$$

なので、フーリエ変換すると

$$\hat{f}(\mathbf{k}) = \frac{\cos k_1 + \cos k_2}{2} \quad (18.56)$$

²⁹⁰任意の $p < 1$ について、 $\sum_{n=1}^{\infty} p^n < \infty$ である。

²⁹¹和の範囲を有限で打ち切っておれば、和と積分は交換するので、あとで極限を取ることでこの交換は正当化できる。

が得られる。このときの積分は

$$\int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_1 dk_2}{1 - \frac{\cos k_1 + \cos k_2}{2}} \geq \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{4dk_1 dk_2}{k_1^2 + k_2^2} \geq \int_{-\pi}^{\pi} \frac{4 \cdot 2\pi r dr}{r^2} \quad (18.57)$$

と下から評価できる。ただし最後の不等式では、変数を (k_1, k_2) から (r, θ) の極座標表示へと変換したうえで、積分範囲を $r \leq \pi$ へと狭めた。この右辺は $k = 0$ ($r \geq 0$) 近傍の積分の寄与が $\ln r$ の速さで対数発散するので、二次元の場合には E は発散し、ランダムウォークは確率 1 で原点に回帰する。

三次元 ($d = 3$) の場合には、

$$f(\mathbf{z}) = \begin{cases} \frac{1}{6} & \mathbf{z} = \begin{pmatrix} \pm 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ \pm 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (18.58)$$

なので、フーリエ変換すると

$$\hat{f}(\mathbf{k}) = \frac{\cos k_1 + \cos k_2 + \cos k_3}{3} \quad (18.59)$$

が得られる。今度は $\cos k \leq 1 - 2k^2/\pi^2$ ($-\pi \leq k \leq \pi$) を用いると、この積分は

$$\int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_1 dk_2 dk_3}{1 - \frac{\cos k_1 + \cos k_2 + \cos k_3}{3}} \leq \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{3\pi^2 dk_1 dk_2 dk_3}{2(k_1^2 + k_2^2 + k_3^2)} \leq \int_{-\sqrt{3}\pi}^{\sqrt{3}\pi} \frac{3\pi^2 \cdot 4\pi r^2 dr}{2r^2} = 12\sqrt{3}\pi^3 \quad (18.60)$$

と上から評価できる。ただし最後の不等式では、変数を (k_1, k_2, k_3) から (r, θ, ϕ) の極座標表示へと変換したうえで、積分範囲を $r \leq \sqrt{3}\pi$ へと広げた。この右辺は有限なので、三次元の場合には E は有限の値にとどまり、ランダムウォークが原点に回帰する確率は 1 未満である。

18.5 応用：ラプラス近似と閾値定理

フーリエ変換の一つの応用として、13.3 節で見たラプラス近似と組み合わせる方法がある。ここではその一つの実例を見ることにしよう²⁹²。

和が偶数であるような²⁹³ 与えられた整数 x_1, \dots, x_n に対し、二つの和が一致するように二つの集合に分ける方法を探そう。すなわち

$$\sum_{i \in S} x_i = \sum_{i \notin S} x_i \quad (18.61)$$

となるような集合 S を探すという問題である。例えば

$$1, 3, 9, 14, 23, 28, 32, 40$$

が与えられたとすると、

$$1 + 9 + 14 + 23 + 28 = 3 + 32 + 40 \quad (18.62)$$

と分割すればよい。この問題は「整数分割問題 (integer partitioning problem)」と呼ばれ、一般の場合にそのような分割が存在するかを判定するのは難しい問題であることが知られている²⁹⁴。

我々は今回、整数がランダムに与えられた際に、このような分割の方法が平均していくつあるか、特に分割が 1 つ以上存在するか、を考察したい。

問題： n は大きな整数とする。 n 個の整数 x_1, \dots, x_n として、 $\{0, 1, 2, \dots, B-1\}$ の整数を等確率でランダムに選ぶ。この状況における整数分割の方法は平均して何通りあるか。

²⁹² ここでの内容は C. Moore and S. Mertens, *The nature of computation*, Oxford university press, Sec.14.5 を参考にした。

²⁹³ 和が奇数だと、そもそも和が一致するように二つの集合に分けることができない。和が奇数の場合には、二つの集合における和について、その差が 1 になるように分割する方法を考えるのが通例である。

²⁹⁴ 計算量クラスでいうと、NP 困難に属する問題である。

また $B = 2^b = 2^{kn}$ として、整数分割がほとんど確実に可能／不可能の転移が起こる $k = k_c$ を求めよ。

我々が知りたい量は

$$Z = \frac{1}{2} \sum_{\{\pm\}^n} \chi(\pm x_1 \pm x_2 \pm x_3 \pm \cdots \pm x_n) \quad (18.63)$$

の期待値 $\mathbb{E}[Z]$ と言い換えることができる²⁹⁵。ただし $\chi(x)$ は $x = 0$ のときに 1 を、それ以外のときには 0 をとる関数とする。ここで、関数 Z をフーリエ変換しよう。デルタ関数のフーリエ変換を思い出すと、整数値をとる x についての $\chi(x)$ のフーリエ変換は

$$\chi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{ix\theta} \quad (18.64)$$

と書ける。そのため、 Z のフーリエ変換は

$$Z = \frac{1}{2} \sum_{\{\pm\}^n} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{i(\pm x_1 \pm \cdots \pm x_n)\theta} = \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \prod_{i=1}^n (e^{ix_i\theta} + e^{-ix_i\theta}) \quad (18.65)$$

となり、特に x_i に関する項の積の形で書ける。この期待値を求めるには、各 x_i について平均を取ればよい。

$$f(\theta) := \mathbb{E}[e^{ix\theta} + e^{-ix\theta}] = \frac{1}{B} \sum_{x=0}^{B-1} (e^{ix\theta} + e^{-ix\theta}) = \frac{1}{B} \left(\frac{e^{iB\theta} - 1}{e^{i\theta} - 1} + \frac{e^{-iB\theta} - 1}{e^{-i\theta} - 1} \right) = \frac{1}{B} \left(1 + \frac{\sin(B - \frac{1}{2})\theta}{\sin \frac{\theta}{2}} \right) \quad (18.66)$$

と計算できるので、

$$\mathbb{E}[Z] = \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{n \ln f(\theta)} \quad (18.67)$$

とラプラス近似の形に持ち込める。 $f(\theta)$ は $\theta = 0$ で最大値を取り、

$$f(0) = 2 \quad (18.68)$$

$$f''(0) = -\frac{2}{3}B^2 + O(B) \quad (18.69)$$

なので、

$$\mathbb{E}[Z] \simeq \frac{2^{n-1}}{B} \frac{1}{\sqrt{\frac{2}{3}\pi n}} \quad (18.70)$$

と分割数を推定できる。

9.3 節で見たモーメント法と閾値定理の方法に従うと、ここでの計算は一次モーメント法による上からの評価として機能する。具体的には、マルコフの不等式より

$$P[Z \geq 1] \leq \frac{\mathbb{E}[Z]}{1} = \frac{2^{n-1}}{B} \frac{1}{\sqrt{\frac{2}{3}\pi n}} \quad (18.71)$$

なので、 $B = 2^b = 2^{kn}$ に対し、整数分割が可能／不可能（ほとんど確実に $Z \geq 1$ となる／ほとんど確実に $Z = 0$ となる、の転移）の転移点 k_c を

$$k_c \leq 1 - \frac{\log_2 n}{2n} \quad (18.72)$$

と上から押さえられる。

次に二次モーメント法を用いて下からの転移点の評価を行おう。このためには Z^2 の期待値を計算する必

²⁹⁵2 で割っているのは、もしある割り当てがゼロになるならば、全体の符号を全て入れ替えたものもまたゼロになるが、この二つは同一の分割だからである。

要がある。再びフーリエ変換を用いると

$$Z^2 = \frac{1}{16\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta d\theta' \prod_{i=1}^n (e^{ix_i\theta} + e^{-ix_i\theta})(e^{ix_i\theta'} + e^{-ix_i\theta'}) \quad (18.73)$$

である。再び各 x_i ごとに期待値を求めると、同様の計算により

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[(e^{ix_i\theta} + e^{-ix_i\theta})(e^{ix_i\theta'} + e^{-ix_i\theta'})] &= \mathbb{E}[e^{ix_i(\theta+\theta')} + e^{ix_i(-\theta+\theta')} + e^{ix_i(\theta-\theta')} + e^{ix_i(-\theta'-\theta)}] \\ &= \frac{1}{B} \left(2 + \frac{\sin(B - \frac{1}{2})(\theta + \theta')}{\sin \frac{\theta+\theta'}{2}} + \frac{\sin(B - \frac{1}{2})(\theta - \theta')}{\sin \frac{\theta-\theta'}{2}} \right) \end{aligned} \quad (18.74)$$

となる。ここで積分変数を θ, θ' から $\xi = \theta + \theta', \eta = \theta - \theta'$ に置き換えよう。 $-\pi \leq \xi, \eta \leq \pi$ の領域を図示すると図 46 左のようになり、 $-\pi \leq \theta, \theta' \leq \pi$ の領域のちょうど半分となる。式 (18.74) 右辺の関数は $\xi \rightarrow \xi + 2\pi, \eta \rightarrow \eta + 2\pi$ の変換で値を変えないので、図 46 右の二つの濃いグレーの領域の積分の値は等しく、太線の正方形中の積分はグレー全域の積分の半分である。一方、 (θ, θ') から (ξ, η) への変数変換のヤコビアンは 2 なので、両者は互いにキャンセルして、結局

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[Z^2] &= \frac{1}{16\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta d\theta' \frac{1}{B^n} \left(2 + \frac{\sin(B - \frac{1}{2})(\theta + \theta')}{\sin \frac{\theta+\theta'}{2}} + \frac{\sin(B - \frac{1}{2})(\theta - \theta')}{\sin \frac{\theta-\theta'}{2}} \right)^n \\ &= \frac{1}{16\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\xi d\eta \frac{1}{B^n} \left(2 + \frac{\sin(B - \frac{1}{2})\xi}{\sin \frac{\xi}{2}} + \frac{\sin(B - \frac{1}{2})\eta}{\sin \frac{\eta}{2}} \right)^n \\ &= \frac{1}{16\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\xi d\eta e^{n \ln(f(\xi)+f(\eta))} \end{aligned} \quad (18.75)$$

となる。ただし f は $\mathbb{E}[Z]$ の評価のときに導入したものである。

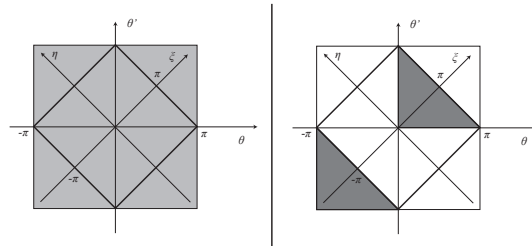


図 46: (左) $-\pi \leq \theta, \theta' \leq \pi$ の領域 (グレーの部分) と $-\pi \leq \xi, \eta \leq \pi$ の領域 (太線)。 (右) 図の二つの濃いグレーの領域の積分は同一のものとなる。

すでにみているように、 $f(\theta)$ は $\theta = 0$ で最大値 2 をとる。そのため、この 2 変数の積分は、以下の二つの寄与を持つ。

1. $\xi = \eta = 0$ 近傍の狭い領域からの大きな寄与
2. $\xi = 0$ (η は一般) または $\eta = 0$ (ξ は一般) 近傍からの寄与 (値は 1 のものより小さいが、 η 軸または ξ 軸にまたがって積分出来るので積分領域が広い)

まず 1 の寄与を考えよう。ラプラスの方法の二次元版は、肩の関数の二階微分の値の代わりに関数のヘシアン行列式を用いた

$$\int d\mathbf{x} g(\mathbf{x}) e^{-Nf(\mathbf{x})} \simeq g(\mathbf{x}^*) \sqrt{\frac{(2\pi)^d}{n^d \det(f''(\mathbf{x}^*))}} e^{-Nf(\mathbf{x}^*)} \quad (18.76)$$

である。ただし x^* は最小値を与える点である。 $g(\xi, \eta) = \ln(f(\xi) + f(\eta))$ について、

$$\det g''(0,0) = \det \begin{pmatrix} -\frac{(f'(\xi))^2}{(f(\xi)+f(\eta))^2} + \frac{f''(\xi)}{f(\xi)+f(\eta)} & -\frac{f'(\xi)f'(\eta)}{(f(\xi)+f(\eta))^2} \\ -\frac{f'(\xi)f'(\eta)}{(f(\xi)+f(\eta))^2} & -\frac{(f'(\eta))^2}{(f(\xi)+f(\eta))^2} + \frac{f''(\eta)}{f(\xi)+f(\eta)} \end{pmatrix} \Bigg|_{\xi,\eta=0} = \det \begin{pmatrix} \frac{f''(0)}{2f(0)} & 0 \\ 0 & \frac{f''(0)}{2f(0)} \end{pmatrix} = \frac{B^4}{36} \quad (18.77)$$

なので、点 $(0,0)$ 近傍からの積分の寄与は

$$\frac{1}{16\pi^2} e^{2n \ln 2} \sqrt{\frac{(2\pi)^2}{n^2 \frac{B^4}{36}}} = 2 \left(\frac{2^{n-1}}{B} \frac{1}{\sqrt{\frac{2}{3}\pi n}} \right)^2 = 2\mathbb{E}[Z]^2 \quad (18.78)$$

と評価できる。

次に2の寄与を考えよう。対称性より、 ξ が0近傍で、 η は0近傍ではない状況を考え、その積分値を2倍すればよい。この積分値は、 $f(\eta) \simeq 0$ と置いて計算すればよく、

$$\frac{1}{16\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\xi d\eta e^{n \ln f(\xi)} = \frac{1}{8\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\xi e^{n \ln f(\xi)} = \frac{1}{2} \mathbb{E}[Z] \quad (18.79)$$

である。よって2の寄与は、上の値を2倍して $\mathbb{E}[Z]$ と分かる。

以上をまとめると

$$\mathbb{E}[Z^2] \simeq 2\mathbb{E}[Z]^2 + \mathbb{E}[Z] \quad (18.80)$$

である。二次モーメント法を用いると

$$P[Z > 0] \geq \frac{\mathbb{E}[Z]^2}{\mathbb{E}[Z]^2} \simeq \frac{1}{2} \frac{\mathbb{E}[Z]}{\mathbb{E}[Z] + 1/2} \quad (18.81)$$

が得られる。ただし最初にかかっている $\frac{1}{2}$ は、総和が偶数でない限り整数分割できない（挿話が奇数の場合には確率1で整数分割は存在しない）ことに起因するものであり、総和を偶数に限定すれば²⁹⁶ この係数はなくなる。

以上より、 $\mathbb{E}[Z]$ が有限の値を取るならば、 $P[Z > 0]$ 、つまり整数分割は可能な確率も有限である。特に $\mathbb{E}[Z]$ が発散するならば、整数分割が可能な確率は1に収束する。よって、 $\mathbb{E}[Z] = O(1)$ が切り替わりの点であり、特に

$$k_c \geq 1 - \frac{\log_2 n}{2n} \quad (18.82)$$

と転移点を上から押さえられる。上下の転移点評価が一致したので、これは

$$k_c = 1 - \frac{\log_2 n}{2n} \quad (18.83)$$

を意味する。

18.6 応用：関数の線形性判定

離散フーリエ変換もいろいろな応用が存在する²⁹⁷。ここでは簡単な例として、ほとんど線形な関数の検証を見てみよう²⁹⁸。関数の線形性には、以下の二通りの特徴づけがある。

1. $f(x) + f(y) = f(x+y)$ が成り立つ。
2. $f(x) = ax$ と書ける。

ただし \mathbb{Z}_2 を $\{\pm 1\}$ で記述している場合には、最初の特徴づけは $f(x)f(y) = f(xy)$ と書き直される。これらが近似的に成り立つというのは、以下のような状況である。

²⁹⁶あるいは総和が奇数の場合には、差が1の分割の有無を考えることにすればよい。

²⁹⁷有限群上のフーリエ変換は、群の指標を用いて記述されるため、群のいろいろな性質と結びつく。

²⁹⁸この問題が何の役に立つのか、一見するとよく分からないと思うが、実はこれは Long code とその検証という、計算機科学（計算量理論）でよく用いられている技法に出現するものである。PCP 定理を軸とした「いくつかの難しい組合せ最適化問題は、近似的にさえ効率的に解くことができない」という結果を証明する際に、Long code が用いられている。

1. 大半の x, y の組に対し、 $f(x) + f(y) = f(x + y)$ が成り立つ。

2. 大半の x について、 $f(x) = ax$ と書ける。

2 ならば 1 が成り立つのは明らかである。我々はその逆、すなわち 1 ならば 2 が成り立つのかを考えたい。結論からいうと、これは成り立つことが示せる。以下、表記は $\{\pm 1\}$ のものを用いる。

問題 : $x, y \in \mathbb{Z}_2^N$ を等確率でランダムに選ぶと、 $f(x)f(y) = f(xy)$ が確率 $p > \frac{1}{2}$ で成り立つとする。このとき、ある a が存在し、確率 p 以上で $f(x) = ax$ と書けることを示せ。

証明. 仮定 $P[f(x)f(y) = f(xy)] = p =: \frac{1}{2} + q$ から、 $\mathbb{E}[f(x)f(y)f(xy)] = 2q$ が言える。これをフーリエ級数展開すると

$$\begin{aligned} 2q &\leq \mathbb{E}[f(x)f(y)f(xy)] \\ &= \mathbb{E}\left[\sum_{n,m,k} \hat{f}_n e_n(x) \hat{f}_m e_m(y) \hat{f}_k e_k(xy)\right] \\ &= \sum_{n,m,k} \hat{f}_n \hat{f}_m \hat{f}_k \mathbb{E}[e_n(x)e_k(x)] \mathbb{E}[e_m(y)e_k(y)] \\ &= \sum_n (\hat{f}_n)^3 \end{aligned} \tag{18.84}$$

が得られる。ここで 3 行目では $e_k(xy) = e_k(x)e_k(y)$ が成り立つことを、4 行目ではプランシャールの定理により $\mathbb{E}[e_n(x)e_k(x)] = \langle e_n, e_k \rangle = \delta_{n,k}$ であることを用いた。パーセヴァルの等式により

$$\sum_n (\hat{f}_n)^3 \leq \max_n \hat{f}_n \sum_{n'} (\hat{f}_{n'})^2 = \max_n \hat{f}_n \tag{18.85}$$

が成り立つので、すべてつなぎ合わせると $2q \leq \max_n \hat{f}_n$ と分かる。

最大値を与える n を n^* とする。指示関数 $e_{n^*}(x)$ 自体が線形関数であることに注意する。これと f との内積は

$$\frac{1}{2^N} \sum_x e_{n^*}(x) f(x) = \langle e_{n^*}, f \rangle = \hat{f}_{n^*} \geq 2q \tag{18.86}$$

である。これは、少なくとも確率 $\frac{1}{2} + q = p$ で、 $f(x)$ と線形関数 $e_{n^*}(x)$ の結果が一致することを意味している。□

18.7 <補論>：連続フーリエ変換の収束と特異性

ここまで、関数の空間が適切に定義されており、また関数がスムーズに収束することを暗黙の前提として、線形代数のときと同じように双対をとったりその表示を行き来したりできるかのように議論してきた。しかし、実空間のフーリエ変換では、収束性の問題などで極めてデリケートな事態が生じることが知られている。特に、「フーリエ変換して逆変換すると元の関数に戻る（フーリエ反転公式）」という性質が何らかの意味で成り立たない状況が生じうる。そのため、数学的に厳密な形でフーリエ変換を扱うことはなかなか面倒くさい²⁹⁹。

以下に、フーリエ変換が収束する場合・しない場合について、いくつか知られている結果をまとめておく³⁰⁰。 $S_N(x) := \sum_{n=0}^N a_n \sin nx + b_n \cos nx = \sum_{n=-N}^N c_n e^{inx}$ と定義する。 $\lim_{N \rightarrow \infty} S_N(x) = f(x)$ がすべての x で成り立つとき、「フーリエ級数は $f(x)$ に各点収束する」という。また、 $\lim_{N \rightarrow \infty} \max_x |S_N(x) - f(x)| = 0$ が成り立つとき、「フーリエ級数は $f(x)$ に一様収束する」という。まず肯定的な結果について。

- $f(x)$ がリーマン可積分なら、測度ゼロの点を除いたほとんどすべての x について、フーリエ級数は $f(x)$ に各点収束する（カルレソン（Carleson））。
- $f(x)$ が（1 回）連続微分可能なら、フーリエ級数は $f(x)$ に一様収束する。

²⁹⁹もう少し詳しくいうと、第 n ディリクレ核 $D_N(x) := \sum_{n=-N}^N e^{inx}$ が「良い核」ではなく、収束性が悪いことがさまざまな難しさを引き起こしている。

³⁰⁰詳細を知りたい人は、エリマス・M. スタイン、ラミ・シャカルチ『フーリエ解析入門』日本評論社などを読んで頂きたい。

一方で、後者の結果の「連続微分可能」を「連続」に置きなおすことはできない。

- $f(x)$ は連続だが、 $\lim_{N \rightarrow \infty} S_N(x) \neq f(x)$ となる x が存在するような $f(x)$ が存在する (デュ・ボア・レイモン (Du Bois Reymond))。

また、2次元以上の場合にはもっと厄介であることが分かっている。

- 2次元以上 ($x \in \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$) の場合には、任意の $p \neq 2$ について、フーリエ反転公式が L^p 収束しない例が存在する³⁰¹ (フェファーマン (Fefferman))。

連続関数でフーリエ反転公式が成り立たない例は、極めて病的な例だが、不連続な関数の場合には一般にいろいろな問題が生じる。ここではその例として「ギブズ現象 (Gibbs phenomena)」を見ておこう。

ギブズ現象は、不連続関数のフーリエ変換において一般的にみられる現象である。分かりやすい例として、矩形波

$$f(x) := \begin{cases} 0 & x = 2n\pi \\ \frac{\pi}{4} & 2n\pi < x < (2n+1)\pi \\ 0 & x = (2n+1)\pi \\ -\frac{\pi}{4} & (2n+1)\pi < x < (2n+2)\pi \end{cases} \quad (18.87)$$

に対するフーリエ級数展開を考えよう (ただし n は整数)。すると、簡単な計算で

$$f(x) = \sin x + \frac{1}{3} \sin 3x + \frac{1}{5} \sin 5x + \dots \quad (18.88)$$

と書けることが分かる。また、部分和

$$f_n(x) := \sum_{j=0}^n \frac{1}{2j+1} \sin(2j+1)x \quad (18.89)$$

を定義すると、任意の x について

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x) = f(x) \quad (18.90)$$

と各点収束することも証明できる。

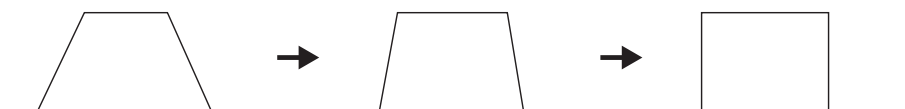


図 47: 矩形波のフーリエ変換の収束の仕方に対するナイーブな見方。台形の傾きがだんだん急になっていって矩形波に収束するだろうと考える人も多いだろうが、実は端の振る舞いはもっと複雑である。

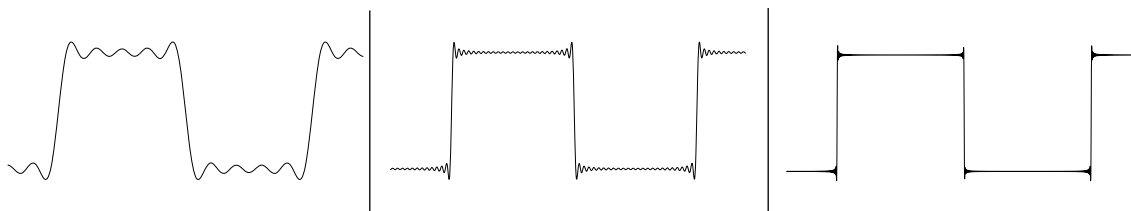


図 48: 左から順に、式 (18.89) の $n = 5$ 、 $n = 25$ 、 $n = 125$ のプロット。矩形波の端の出っ張りが、 n を大きくしても消えないことが分かる。画像は Wikipedia 「ギブズ現象」より引用。

一方、 $f_n(x)$ は $f(x)$ には一様収束しない。一様収束しないこと自体は、フーリエ級数展開の右辺が x の連続関数である一方、 $f(x)$ が不連続関数であることを考えれば、自然な帰結ではある。しかし、多くの

³⁰¹ 反例の構成には「ベンコビッチ集合 (Besicovitch set)」というフラクタル図形が用いられる。「長さ 1 の線分を 2 次元平面内で 180 度回転させる際、線分が通過する領域の面積の最小値はどれだけか」という問題が「掛谷の問題」である。実は驚くべきことに、この問題は「面積ゼロに出来る」が答えである。そして、その際の通過領域がベンコビッチ集合である。

は、図 47 のように「台形のような波形が、ただどんどん傾きが急になる形で矩形波に収束していく」と思うのではないだろうか。ところが、実は正側の $x = 0$ 近傍において、 $\frac{\pi}{4}$ より真に「大きな」値をとり続ける点が存在し続けることが示せる。具体的には

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_n \left(\frac{\pi}{n+1} \right) = \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{2} \cdot 0.089490 \dots \quad (18.91)$$

となることが証明出来る。ただし $0.089490 \dots$ は

$$= 0.089490 \dots = \int_0^{\pi} dx \frac{\sin x}{x} - \frac{\pi}{2} \quad (18.92)$$

によって定まる値である。要するに、反対側への（約 2 割ほどの）オーバーシュートが起きているのである。図 48 を見るとわかるように、 $x = 0$ 近傍では出っ張りが発生しており、これは n をどれだけ大きくしても消えない。これは不連続点のフーリエ変換で一般的にみられる現象で、「ギブズ現象 (Gibbs phenomenon)」と呼ばれている。フーリエ変換を含む数値計算をする際には、注意しておく必要のある現象であろう。（なお、有限の出っ張りがあるにもかかわらず各点収束するのは、出っ張りの位置が n が大きくなるにつれてどんどん $x = 0$ 近傍に寄っていくからである）

なお式 (18.91) の証明は難しくない。 $g(x) := \frac{\sin x}{x}$ と置くと

$$f_n \left(\frac{\pi}{2(n+1)} \right) = \sum_{j=1}^n \frac{1}{2j+1} \sin \left(\frac{2j+1}{2n+2} \pi \right) = \frac{1}{2n+2} \sum_{j=1}^n \frac{2n+2}{2j+1} \sin \left(\frac{2j+1}{2n+2} \pi \right) = \frac{\pi}{2n+2} \sum_{j=1}^n g \left(\frac{2j+1}{2n+2} \pi \right) \quad (18.93)$$

なので、 $n \rightarrow \infty$ 極限で和を積分に置き換えることができ、右辺が $\frac{1}{2} \int_0^{\pi} dx \frac{\sin x}{x}$ に収束することから示せる。

なお、高次元の場合には特異性はもっと激しくなることが知られている。3 次元以上の場合、半径 1 の単位球の特性関数（単位球内は 1、その外では 0 をとる関数）をフーリエ変換して逆変換すると、（不連続性のない）原点で発散が生じることが知られている（ピンスキー現象 (Pinsky phenomena)）。また、5 次元以上の場合には、任意の有理点で発散が生じることが知られている（倉坪現象）。

19 直交多項式系

一般の直交多項式系 (system of orthogonal polynomials) は、17.2 節で見たように、重み付き内積 (17.9) (以下再掲)

$$\langle f(x), g(x) \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} dx f^*(x) g(x) \rho(x) \quad (19.1)$$

を用いて、 $1, x, x^2, \dots$ に対してグラム・シュミットの正規直交化法を適用して得られるもののことである。

直交多項式系は $\rho(x)$ の種類だけ存在するが、ここでは特に、スツルム・リュウビル型微分方程式 (17.30) (以下再掲)

$$\rho(x) Lf(x) = \left(\frac{d}{dx} p(x) \frac{d}{dx} - q(x) \right) f(x) = -\lambda \rho(x) f(x) \quad (19.2)$$

を満たすクラスである「古典的直交多項式」に対象を限定する。古典的直交多項式は、実は本質的には 3 種類しか存在しないことが知られているので、この 3 つを調べればよい³⁰²。

古典的直交多項式系の性質は、これら 3 つを統一的に扱える場合もあれば、3 つそれぞれ個別に計算をしなければいけない場合もある。この講義ノートでは、統一的に扱える場合はなるべく統一的な記述を行うようにした。

19.1 古典的直交多項式の分類

1 次元の微分方程式の区間は、「有限: $a \leq x \leq b$ 」「半無限 $a \leq x < \infty$ 」「無限 $-\infty < x < \infty$ 」の 3 種類が存在する。そして、適切な線形変換 $x \rightarrow Ax + B$ を施すことにより、それぞれの区間は $-1 \leq x \leq 1$ 、 $0 \leq x < \infty$ 、 $-\infty < x < \infty$ としても一般性を失わない。この 3 つの区間それぞれに対し、古典的直交多項式系が一つずつ存在する³⁰³。

定理 19.1 (ボホナーの定理 (Bochner's theorem)). 直交多項式系 $\{P_n(x)\}$ ($n = 0, 1, 2, \dots: P_n(x)$ は n 次多項式³⁰⁴) で、適切な境界条件の下での以下の形の微分方程式

$$p(x) \frac{d^2}{dx^2} P_n(x) + r(x) \frac{d}{dx} P_n(x) + q(x) P_n(x) = \lambda_n P_n(x) \quad (19.3)$$

を満たすとする。このような直交多項式系は、表 1 で与えられるヤコビ多項式 (Jacobi polynomial)³⁰⁵、ラゲール陪多項式 (associated Laguerre polynomial)、エルミート多項式 (Hermite polynomial) に限られる。

区間	名前	記号	$\rho(x)$	$h(x)$	因子
[-1, 1]	Jacobi	J_n	$(1-x)^a(1+x)^b$	$(1-x^2)$	-1
	Legendre		1	$(1-x^2)$	-1
[0, ∞)	Laguerre	L_n	e^{-x}	x	
[0, ∞)	associated Laguerre	L_n	$x^a e^{-x}$	x	
$(-\infty, \infty)$	Hermite	H_n	e^{-x^2}	1	-1

表 1: 古典的直交多項式系のリスト。ただしラゲール陪多項式のパラメータは $a > -1$ 、ヤコビ多項式のパラメータは $a, b > -1$ を満たすとする。ルジャンドル多項式はヤコビ多項式の特珠な場合で、 $a = b = 0$ に相当する。因子 -1 は、(最高次係数を正にするために) $h(x)$ の定義をさらに -1 倍することを表す。

³⁰²本章の内容は、立川さんの物理数学 II の講義ノート (<https://member.ipmu.jp/yuji.tachikawa/lectures/2014-butsumisugaku2/>)、H. ホックシタット『特殊関数——その理・工学への応用』培風館、犬井鉄郎『特殊関数』岩波書店などに基づく。より詳しく知りたい人はこれらの文献も適宜参照していただきたい。

³⁰³実はもう一つ、周期境界条件に対応する $|x| = 1$ (ただしここでは x は複素数。つまりこの領域は複素数平面の単位円周上) という領域が存在する。これに対しては「ベッセル多項式」という直交多項式系が存在する (これはよく特殊関数論で取り上げられるベッセル関数とは別物!)。ただしベッセル多項式はやや性質が異なるので、ここでは取り上げない。

³⁰⁵ヤコビ多項式及びルジャンドル多項式は P_n と書くことも多いが、今回は一般的多項式との混同を避けるために J_n と置いた。

スツルム・リウヴィル型微分方程式と対応付けるときには、 $q(x) = p'(x)$ と置く。 $n = 0, 1, 2$ の多項式が存在するという条件から、 $q(x), r(x), p(x)$ がそれぞれ 0 次、1 次、2 次以下の多項式であることが直ちにわかる。ここではポホナーの定理は特に証明せず、結果を正しいと認めて議論を進める。

$\rho(x)$ が与えられたので、これに対してグラム・シュミットの直交化法を施せば、それぞれの直交多項式が原理的には定まる。しかし、それだと各多項式がどのような形なのか、どういう性質を持っているのか議論しづらい。そのため、ほとんどの教科書では以下の「ロドリゲスの公式」を用いて各多項式を与える³⁰⁶。

定理 19.2 (ロドリゲスの公式 (Rodrigues' formula))。 n 次の古典的直交多項式は

$$P_n(x) = \frac{1}{\rho(x)} \frac{d^n}{dx^n} \rho(x) (h(x))^n \quad (19.4)$$

で与えられる。ただし $h(x)$ は端点でゼロになる最低次の多項式を選ぶ。具体的には、ヤコビ多項式るとき $-(1-x^2)$ 、ラゲール陪多項式³⁰⁷ のとき x 、エルミート多項式るとき -1 ととる。

ロドリゲスの公式で (規格化除き) 正しく直交多項式が与えられることを、以下の 2 つを示す形で示す。

- $P_n(x)$ は n 次多項式である。
- 任意の $m < n$ について、 $\langle P_n(x), x^m \rangle = 0$

1 つ目の性質より P_m は m 次多項式なので、2 つ目の性質により $m < n$ ならば $\langle P_n(x), P_m(x) \rangle = 0$ が言える。内積の左右を入れ替えることで、 $m \neq n$ ならば $\langle P_n(x), P_m(x) \rangle = 0$ であることが言える。そのためこの $P_n(x)$ は求めたかった直交多項式だと分かる。

n 次多項式であることの証明。 ラゲール陪とエルミートの場合はほぼ明らかなので、ヤコビの場合についてだけ示す。 $\rho(x)(h(x))^n = (1-x)^a(1+x)^b(-1)^n(1-x^2)^n = (-1)^n(1-x)^{a+n}(1+x)^{b+n}$ を n 回 x 微分すると、

$$\frac{d^n}{dx^n} (1-x)^{a+n}(1+x)^{b+n} = \sum_{m=0}^n \binom{n}{m} \frac{d^m}{dx^m} (1-x)^{a+n} \frac{d^{n-m}}{dx^{n-m}} (1+x)^{b+n} = \sum_{m=0}^n c_m (-1)^m (1-x)^{a+n-m} (1+x)^{b+m} \quad (19.5)$$

という形になる。ただし c_m は適切な正の係数である。これを $(1-x)^a(1+x)^b$ で割れば、得られるのは n 次多項式である³⁰⁸。□

直交性の証明。 部分積分を繰り返すことにより、 $n > m$ の場合

$$\begin{aligned} \langle P_n(x), x^m \rangle &= \int dx x^m \frac{d^n}{dx^n} \rho(x) (h(x))^n = (-1)^m m! \int dx \frac{d^{n-m}}{dx^{n-m}} \rho(x) (h(x))^n \\ &= (-1)^m m! \left[\frac{d^{n-m-1}}{dx^{n-m-1}} \rho(x) (h(x))^n \right] \end{aligned} \quad (19.6)$$

となる ($n = m$ の場合、最後の等式が成り立たない点に注意)。ここで微分の回数が n 回より少ないため、右辺は必ず $h(x)$ でくくれる。 $h(x)$ は端点でゼロなので、右辺はゼロである。□

ちなみに、今回は $h(x)$ と $\rho(x)$ を与えて、それが直交多項式となることを示したが、逆に $h(x)$ とロドリゲスの公式を与えて、 $P_n(x)$ が n 次多項式であるべきという条件から $\rho(x)$ を今の形に絞って込むことも出来る。例えば、ヤコビ多項式の場合であれば、

$$J_1(x) = \frac{\rho'(x)}{\rho(x)} (1-x^2) - 2x = Ax + B \quad (19.7)$$

³⁰⁵ $n = 0$ から始まる、というのは実は重要で、 $n = 0$ が存在しなくてもよい場合には、これら以外の直交多項式系が存在してもよい、ということが最近明らかになってきている。これらは「例外直交多項式」と呼ばれる。これについての解説としては、小林悟「解ける量子力学模型と直交多項式」(日本物理学会誌 2016 年 71 巻 3 号 p. 156-163) がある。

³⁰⁶ 係数に $n!$ などの補正がつくこともある。本質的な違いはないが、のちに述べる漸化式や積分表示の細かな部分が変更を受ける。

³⁰⁷ ラゲール陪多項式の場合、慣習的に任意の n で $L_n(0) = 1$ となるように規格化する。最高次係数は正も負もとる。

³⁰⁸ m の和をとる各項の最高次係数は正なので、和をとる際にキャンセルして係数ゼロになることはない。

という条件が得られるので、これを変数分離法で解いて $\rho(x) = (1-x)^a(1+x)^b$ の形にならないといけな
いことが示せる。

[19-1]. ラゲール陪多項式の場合に、 $h(x) = x$ とロドリゲスの公式の形から $\rho(x)$ の形を導け。

これらの直交多項式は、自分自身との内積は必ずしも 1 には規格化されていない。ロドリゲスの公式と
して (19.4) の定義を用いた場合、ヤコビ多項式、ラゲール陪多項式、エルミート多項式の場合の自分自身
との内積はそれぞれ

$$\int_{-1}^1 dx \rho(x) (J_n(x))^2 = \frac{2^{2n+a+b+1}}{2n+a+b+1} \frac{\Gamma(n+a+1)\Gamma(n+b+1)n!}{\Gamma(n+a+b+1)} \quad (19.8)$$

$$\int_0^\infty dx \rho(x) (L_n(x))^2 = n! \Gamma(n+a+1) \quad (19.9)$$

$$\int_{-\infty}^\infty dx \rho(x) (H_n(x))^2 = \sqrt{\pi} 2^n n! \quad (19.10)$$

となっている。

19.2 古典的直交多項式の等価な特徴づけ

古典的直交多項式には、ロドリゲスの公式以外にもいろいろな特徴づけ、表示が存在する。ここでは、微
分方程式、母関数、漸化式という 3 つの表示を順にみていこう。

微分方程式

微分方程式を与える演算子 L として、 $p(x) = \rho(x)h(x)$ 、 $q(x) = 0$ と選ぶ³⁰⁹。すなわち

$$L = \frac{1}{\rho(x)} \frac{d}{dx} \rho(x) h(x) \frac{d}{dx} = h(x) \frac{d^2}{dx^2} + \left(\frac{\rho'(x)}{\rho(x)} h(x) + h'(x) \right) \frac{d}{dx} \quad (19.11)$$

とする。ここで、3 つの直交多項式系すべてにおいて、 $h(x)$ は x の高々 2 次、 $\frac{\rho'(x)}{\rho(x)} h(x) + h'(x)$ は x の 1 次
の多項式なので、 $LP_n(x)$ は x の高々 n 次多項式であることが分かる。つまり、以下の形に展開できる。

$$LP_n(x) = \sum_{m=1}^n c_m P_m(x) \quad (19.12)$$

一方、 L のエルミート性³¹⁰、すなわち $\langle f, Lg \rangle = \langle Lf, g \rangle$ を用いると、 $m < n$ の場合に

$$\langle P_m(x), LP_n(x) \rangle = \langle LP_m(x), P_n(x) \rangle = 0 \quad (19.13)$$

が言える。ただし二つ目の等式は、 $LP_m(x)$ が高々 m 次多項式であり、 x^m ($m < n$) と $P_n(x)$ は全て直交
するという事実による。すなわち、 $m < n$ ならば、 c_m はすべてゼロである。これは $P_n(x)$ が、 L を用いた
スツルム・リュウビル方程式

$$LP_n(x) = -\lambda_n P_n(x) \quad (19.14)$$

の形で書けることを意味している。ただし $\lambda_n = -c_n$ は固有関数 $P_n(x)$ に対応する固有値 (の -1 倍) で
あり、この値を具体的に求めたい場合には $P_n(x)$ と内積をとって x^n の係数比較をすればよい。例えばエル
ミートの場合には、 $H_n(x)$ の最高次係数を k_n とすると、 x^n の係数は

$$LH_n(x) = \left(\frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} \right) H_n(x) = -2nk_n x^n + \dots \quad (19.15)$$

となるので、

$$\lambda_n = 2n \quad (19.16)$$

³⁰⁹前にコメントしたように $q(x)$ は定数項なので、これは常に固有値 λ の方に押し付けることができる。

³¹⁰部分積分を 2 回行うことで直接確認することも出来る。

と分かる。これを代入すると

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + 2n \right] H_n(x) = 0 \quad (\text{Hermite}) \quad (19.17)$$

という微分方程式が得られる。他の場合も同様にして

$$\left[x \frac{d^2}{dx^2} + (1-x) \frac{d}{dx} + n \right] L_n(x) = 0 \quad (\text{Laguerre}) \quad (19.18)$$

$$\left[x \frac{d^2}{dx^2} + (a+1-x) \frac{d}{dx} + n \right] L_n(x) = 0 \quad (\text{a-Laguerre}) \quad (19.19)$$

$$\left[(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} + (b-a - (a+b+2)x) \frac{d}{dx} + n(n+a+b+1) \right] J_n(x) = 0 \quad (\text{Jacobi}) \quad (19.20)$$

が得られる。

[19-2]. ヤコビ多項式の場合を導出せよ。

母関数

14.1 節では、数列に対して新しいパラメータを導入して母関数を作った。今回は、一変数関数列 $P_n(x)$ に対して新しいパラメータ y を導入して、二変数関数の母関数を作る。母関数 $G(x, y)$ は

$$G(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) \frac{y^n}{n!} \quad (19.21)$$

で定義される。通常の母関数と同様に

$$P_n(x) = \left. \frac{\partial^n}{\partial y^n} G(x, y) \right|_{y=0} \quad (19.22)$$

が成り立つので、母関数はすべての直交多項式系の情報を持っている。

母関数を求めるには、「グルサの定理 (Goursat's theorem)」

$$\frac{d^n}{dx^n} f(x) = \frac{n!}{2\pi i} \oint dz \frac{f(z)}{(z-x)^{n+1}} \quad (19.23)$$

により微分を留数積分の形で表すのが便利である。ロドリゲスの公式と等比数列の和の公式を用いると

$$G(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2\pi i \rho(x)} \oint dz \frac{\rho(z) h(z)^n y^n}{(z-x)^{n+1}} = \frac{1}{2\pi i \rho(x)} \oint dz \frac{\rho(z)}{z-x-h(z)y} \quad (19.24)$$

が得られる。それぞれ $h(z)$ と $\rho(z)$ を代入して留数積分すると、エルミート、ラゲール陪、ヤコビ多項式の母関数は順に

$$G(x, y) = e^{x^2} e^{-(x-y)^2} = e^{2xy-y^2} \quad (\text{Hermite}) \quad (19.25)$$

$$G(x, y) = \frac{e^x}{1-y} e^{-x/(1-y)} = \frac{e^{-xy/(1-y)}}{1-y} \quad (\text{Laguerre}) \quad (19.26)$$

$$G(x, y) = \frac{e^x}{(1-y)x^a} \left(\frac{x}{1-y} \right)^a e^{-x/(1-y)} = \frac{e^{-xy/(1-y)}}{(1-y)^{a+1}} \quad (\text{a-Laguerre}) \quad (19.27)$$

$$G(x, y) = \frac{2^{a+b}}{R(1+R-y)^a(1+R+y)^b} \quad (\text{Jacobi}) \quad (19.28)$$

と書ける³¹¹。ただしヤコビ多項式の R は $R = \sqrt{1-2xy+y^2}$ である³¹²。

³¹¹ 文献 (岩波公式集など) によっては、 $L_n/n!$ をラゲール多項式と定義しているものもある。その場合には、母関数は $n!$ で割らない形で定義しないと同じ形にならない。また漸化式はここで述べたのとは違う形になる。

³¹² ヤコビ多項式の場合の導出は煩雑である。犬井鉄郎『特殊関数』岩波書店に計算の工夫が出ている。

漸化式

漸化式そのものは、古典的な場合に限らず一般の直交多項式系において得られるものである。 n 次の多項式の最高次係数を k_n とする。すなわち $P_n(x) = k_n x^n + \dots$ とする。すると、 $A_n = k_{n+1}/k_n$ とすると

$$P_{n+1}(x) - A_n x P_n(x) = \sum_{m=0}^n c_m P_m(x) \quad (19.29)$$

と書ける。ただし c_m は適当な係数である。左辺は x^{n+1} の項が消えるので、最高次が x^n である点に注意する。

ここで、式(19.29)左辺に対して $P_m(x)$ ($m \leq n$) との内積をとると、第一項目については $\langle P_m(x), P_{n+1}(x) \rangle = 0$ が成り立ち、また第二項目についても $m < n-1$ の場合には

$$\langle P_m(x), x P_n(x) \rangle = \langle x P_m(x), P_n(x) \rangle = 0 \quad (19.30)$$

となる。よって式(19.29)右辺の c_m は、 $m = n, n-1$ を除いてすべてゼロであることが分かる。 $\langle x P_{n-1}(x), P_n(x) \rangle = k_{n-1}/k_n$ なので、 $C_n = A_n/A_{n-1}$ とおくと

$$P_{n+1}(x) - (A_n x + B_n) P_n(x) + C_n P_{n-1} = 0 \quad (19.31)$$

という漸化式が得られる。ただし $B_n = -A_n \langle x P_n(x), P_n(x) \rangle$ である。これは具体的に解いて求める必要がある。

古典的直交多項式の場合は、母関数を用いて漸化式を速やかに導出することも出来る。具体的には、 $G(x, y)$ の式と式(19.24)の右辺を y で微分して係数比較することにより、 $P_n(x)$ と $P_{n\pm 1}(x)$ とを結びつける漸化式が得られる。例えば、エルミート多項式の場合は、

$$\frac{\partial}{\partial y} \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{y^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{y^{n-1}}{(n-1)!} \quad (19.32)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} e^{2xy-y^2} = (2x-2y)e^{2xy-y^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(2x H_n(x) \frac{y^n}{n!} - 2 H_n(x) \frac{y^{n+1}}{n!} \right) \quad (19.33)$$

なので、両者の y^n の係数を比較して

$$H_{n+1}(x) - 2x H_n(x) + 2n H_{n-1}(x) = 0 \quad (\text{Hermite}) \quad (19.34)$$

が得られる。同様にして

$$L_{n+1} - (2n+1-x)L_n(x) + n^2 L_{n-1}(x) = 0 \quad (\text{Laguerre}) \quad (19.35)$$

$$L_{n+1} - (2n+a+1-x)L_n(x) + n(n+a)L_{n-1}(x) = 0 \quad (\text{a-Laguerre}) \quad (19.36)$$

が得られる³¹³。

ちなみに、母関数を x で微分すると、直交多項式の微分についての関係式が得られる。やり方は同様なので省略し結果のみ示すと

$$H'_n(x) = 2n H_{n-1}(x) \quad (\text{Hermite}) \quad (19.38)$$

$$L'_n(x) = L'_{n-1}(x) - L_{n-1}(x) \quad (\text{Laguerre/a-Laguerre}) \quad (19.39)$$

である。ヤコビ多項式の場合は省略する。

³¹³ヤコビ多項式の場合も同様に計算すると式が得られるが計算は非常に面倒である。結果のみ引き写すと

$$2(n+1)(n+a+b+1)S J_{n+1}(x) - (S+1)[S(S+2)x + (a^2 - b^2)] J_n(x) + 2(n+a)(n+b)(S+2) J_{n-1}(x) = 0 \quad (19.37)$$

である。ただし $S = 2n + a + b$ と置いた。

[19-3]. エルミート多項式の場合の微分の関係式を導出せよ。

19.3 陪多項式

ここまで、ラゲール陪多項式は天下一りに定義し、ラゲール多項式との関係は、ラゲール多項式がその特殊な場合 ($a = 0$) に含まれることを確認するにとどめていた。一般に、「 \sim 陪多項式」は「 \sim 多項式」の微分で得られる多項式を指す。ただしこの場合、 a を非負整数に限定する必要がある。

$\rho(x) = x^a e^{-x}$, $h(x) = x$ で定義されたラゲール陪多項式が、ラゲール多項式の微分で得られることは簡単に確認できる。ラゲールの微分方程式 (19.18) の両辺を x で a 回微分すると、

$$\frac{d^a}{dx^a} \left[x \frac{d^2}{dx^2} + (1-x) \frac{d}{dx} + n \right] L_n(x) = \left[a \frac{d}{dx} + x \frac{d^2}{dx^2} - a + (1-x) \frac{d}{dx} + n \right] \frac{d^a}{dx^a} L_n(x) = 0 \quad (19.40)$$

が得られるので、整理すると角カッコ内はラゲールの陪微分方程式 (19.19) そのものになる。よって $\frac{d^a}{dx^a} L_n(x)$ がラゲール陪多項式になる。

ラゲール多項式以外に、ルジャンドル多項式についても陪多項式はよく議論される。しかし、これは $\rho(x) = (1-x^2)^a$, $h(x) = 1-x^2$ の場合に相当し、これはヤコビ多項式の特殊な場合なので、ここではこれ以上議論しない。

19.4 応用：量子力学

古典的直交多項式の出現例としては、量子力学の固有状態がよく知られている。量子状態はそれ自身同士が直交しないといけないので、 n 番目の固有状態は

$$\psi_n(x) = C \cdot \sqrt{\rho(x)} P_n(x) \quad (19.41)$$

という形に置くのが妥当だろうと考えられる。(より一般には右辺は任意の関数 $f(x)$ を用いて $C \cdot f'(x) \sqrt{\rho(f(x))} P_n(f(x))$ とする。実際、ラゲール陪多項式やルジャンドル多項式ではこの形で出現する)。このように置いて、元々の微分方程式に代入する³¹⁴ ことで、 ψ の満たすべき微分方程式が得られる。

例えば $\psi_n(x) = C \cdot \sqrt{\rho(x)} H_n(x)$ とエルミート多項式を用いて作った状態は

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - x^2 \right] \psi(x) = \lambda \psi(x) \quad (19.42)$$

を満たす。これは調和振動子のシュレディンガー方程式である。同様にラゲール陪多項式を用いた場合には、3次元の水素原子 (逆二乗ポテンシャル) の動径方向のシュレディンガー方程式が得られる。ヤコビ多項式の特別な場合に当たるルジャンドル多項式は、球面調和関数の θ (南北) 方向において現れる。人工的な設定でよければ、ヤコビ多項式を解に持つ量子力学のモデルも存在する³¹⁵。

19.5 応用：電磁気学の境界値問題

球対称な系のラプラシアンを扱う問題では、ルジャンドル多項式を用いると便利ことが多い。ここでは、静電場のポテンシャル V を求める境界値問題を考えよう。ラプラシアンを極座標表示すると

$$\Delta V = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} V \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial V}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} V \quad (19.43)$$

³¹⁴ $P_n(x) = \psi_n / \sqrt{\rho(x)}$ なので、これを元の微分方程式に代入して整理する。

³¹⁵ ダルブー・ポッセル・テラー模型 (Darboux-Pöschel-Teller model) がその例を与える。

と書ける³¹⁶。 V が調和関数 ($\Delta V = 0$) で、かつ V が軸対象で ϕ 依存性を持たないときには

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial V}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial V}{\partial \theta} \right) = 0 \quad (19.45)$$

が成り立つ。

V が変数分離型

$$V(r, \theta) = R(r)F(\theta) \quad (19.46)$$

であると仮定して、これを式 (19.45) に代入すると

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) = - \frac{1}{F \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial F}{\partial \theta} \right) = C \quad (19.47)$$

が成り立たないといけないことが分かる。ただし C は定数である。のちの便利のために $C = l(l+1)$ と置くことにする。

$R(r)$ の微分方程式は容易に解けて、

$$R_l(r) = Ar^l + \frac{B}{r^{l+1}} \quad (19.48)$$

が一般解だと分かる。 $F(\theta)$ の微分方程式は、変数変換することで、ルジャンドル多項式 P_n を用いて

$$F_l(\theta) = P_l(\cos \theta) \quad (19.49)$$

が解だと確認できる³¹⁷。

この表示を利用して、以下の境界値問題を考えてみよう。

問題：半径 a の球殻上に、軸対象 (θ にのみ依存) のポテンシャルの値 $V_0(\theta)$ が指定されている。球殻内部のポテンシャルを求める方法を与えよ。

まず一般解は

$$V(r, \theta) = \sum_l R_l(r)F_l(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \left(A_l r^l + \frac{B_l}{r^{l+1}} \right) P_l(\cos \theta) \quad (19.50)$$

である。今の問題設定の場合、原点が領域に含まれているため、 $r=0$ でポテンシャルが発散しないという物理的条件から、すべての l について $B_l = 0$ と分かる。よって拘束条件は

$$\sum_{l=0}^{\infty} A_l a^l P_l(\cos \theta) = V_0(\theta) \quad (19.51)$$

と書ける。これを満たす A_l の組を見つければよい。

幸いなことに、 A_l を求める簡単な機械的な手続きが存在する。ルジャンドル多項式の直交性から

$$\int_{-1}^1 P_l(x)P_{l'}(x)dx = \int_{-\pi}^{\pi} P_l(\cos \theta)P_{l'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \begin{cases} \frac{2}{2l+1} & l = l' \\ 0 & l \neq l' \end{cases} \quad (19.52)$$

が成り立つ。そのため、フーリエ変換のときなどと同様に

$$A_l = \frac{(2l+1)a^l}{2} \int_{-\pi}^{\pi} V_0(\theta)P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta \quad (19.53)$$

³¹⁶一般に、パラメータ z_1, z_2, z_3 を用いた表示において、微小距離が $ds^2 = (n_1 z_1)^2 + (n_2 z_2)^2 + (n_3 z_3)^2$ と表されるならば、この座標系のラプラシアンは

$$\Delta = \frac{1}{n_1 n_2 n_3} \left(\frac{\partial}{\partial z_1} \frac{n_2 n_3}{n_1} \frac{\partial}{\partial z_1} + \frac{\partial}{\partial z_2} \frac{n_1 n_3}{n_2} \frac{\partial}{\partial z_2} + \frac{\partial}{\partial z_3} \frac{n_1 n_2}{n_3} \frac{\partial}{\partial z_3} \right) \quad (19.44)$$

と書ける。極座標の場合この表示は、 $(z_1, z_2, z_3) = (r, \theta, \phi)$ の下で、 $n_1 = 1, n_2 = r \sin \theta, n_3 = r$ と置いて計算すれば得られる。

³¹⁷二階微分方程式なので F はもう一つ別の解を持つはずである。だが、その解は $\theta = 0, \pi$ で発散を生じる非物理的解なので、ここでは考察対象から外している。

と展開係数を求めることが出来る。

19.6 応用：有限次元スピングラスの基底状態のカオス性

直交多項式の面白い応用として、有限次元スピングラス模型の基底状態（最低エネルギー状態）におけるカオス性（disorder chaos）の証明を取り上げよう。スピングラスとは、スピン同士の相互作用係数 J がランダムに与えられる模型である。13.5 節で見たホップフィールド模型は、スピングラスの模型の一つの例である。「disorder chaos」とは、ごく一部のエッジでこのランダムな相互作用変数を違う値にしてしまうと、基底状態が大きく変化してしまう現象のことである。この節では、ホップフィールド模型とはまた別の（より標準的な）スピングラス模型を扱い、disorder chaos が生じることを見よう³¹⁸。

以下の定理はかなり一般的なスピングラス模型に対して成り立つが、ここでは特に各格子点上に $S = \pm 1$ をとる古典スピンが存在し、相互作用は最近接格子点同士でのみ行う状況を考える。このハミルトニアンは

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j \quad (19.54)$$

で与えられる。ただし相互作用係数 J_{ij} は、 i と j が最近接でないならばゼロを取り、最近接ならば平均 0、分散 1 のガウス分布からエッジごとにサンプルすることにする。相互作用係数（の束）が \mathbf{J} のときの基底状態を $\sigma^{\mathbf{B}}(\mathbf{J})$ と書くことにする³¹⁹。

相互作用変数を少しだけ変更する方法として、エッジごとに、確率 $1-p$ で相互作用係数を \mathbf{J} のものに維持し、確率 p で同じ平均 0、分散 1 のガウス分布から値をリサンプリングするという手続きを用いることにしよう。この手続きで新たに得られた相互作用係数の束を $\tilde{\mathbf{J}}$ と書くことにする。元の相互作用係数 \mathbf{J} と微修正後の相互作用係数 $\tilde{\mathbf{J}}$ それぞれの基底状態の近接度の定量化として、

$$R(p) = \frac{1}{V} \sum_i \sigma_i^{\mathbf{B}}(\mathbf{J}) \sigma_i^{\mathbf{B}}(\tilde{\mathbf{J}}) \quad (19.55)$$

という量を用いて、 R^2 を指標として考える。これは、二つの基底状態のオーバーラップの度合いを与える量である。二つの基底が完全に一致する状況では、 $R = \pm 1$ であり、 $R^2 = 1$ となる。一方、二つの基底が完全に無相関ならば、 R および R^2 はゼロに収束する。

以下の定理は、微小な p に対しても、熱力学極限でオーバーラップがなくなることを示している。

問題：任意の $p > 0$ に対し、元の相互作用係数 \mathbf{J} と微修正後の相互作用係数 $\tilde{\mathbf{J}}$ それぞれの基底状態のオーバーラップ期待値 $\mathbb{E}[(R(p))^2]$ は、系のサイズ V に対して、 $1/V$ 以上の速さでゼロに収束することを示せ

証明. 基底状態の二点 i, j 間の相関 $f(\mathbf{J}) := \sigma_i^{\mathbf{B}}(\mathbf{J}) \sigma_j^{\mathbf{B}}(\mathbf{J})$ を考える。これは、 \mathbf{J} を引数に持つ N_E 変数関数である。ただし、この系のエッジの総数を N_E とした。この関数を、 N_E 個の規格化されたエルミート多項式の積で展開する。すなわち

$$f(\mathbf{J}) = \sigma_i^{\mathbf{B}}(\mathbf{J}) \sigma_j^{\mathbf{B}}(\mathbf{J}) = \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{N}^{N_E}} \hat{f}_{\mathbf{n}} h_{\mathbf{n}}(\mathbf{J}) = \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{N}^{N_E}} \hat{f}_{\mathbf{n}} \prod_e h_{n_e}(J_e) \quad (19.56)$$

と展開する。ただし \mathbf{n} は各エッジごとに自然数を割り振った N_E 次元ベクトルであり、エッジ e における値を n_e と表している。 $h_n(x)$ は、ガウス分布に対する規格化条件

$$\int dx [h_n(x)]^2 \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{\pi}} = 1 \quad (19.57)$$

³¹⁸以下の内容は、Sourav Chatterjee, “Spin glass phase at zero temperature in the Edwards-Anderson model”, arXiv:2301.04112 に基づく。

³¹⁹ある配位が基底であれば、そのスピンを全部反転させたものもまた基底なので、一般に基底状態は 2 つある。ここでは、そのうち一方のみを選び取るものとする。最終的に計算する量は、どちらの基底を選んでも同じ結果となる量なので、この定義の曖昧さは結果に影響を与えない。

を満たすように係数を選ぶことにする。展開係数 \hat{f}_n は、エルミート多項式の正規直交性より

$$\hat{f}_n = \int d\mathbf{J} f(\mathbf{J}) \prod_e h_{n_e}(J_e) \frac{e^{-J_e^2}}{\sqrt{\pi}} = \mathbb{E}[f(\mathbf{J})h_n(\mathbf{J})] \quad (19.58)$$

で定まる。ただし \mathbb{E} は相互作用係数についてのランダム平均である。最後の等式では、エルミート多項式の重み係数 e^{-x^2} が、エッジの相互作用係数のランダム平均の分布（ガウス分布）と一致していることを利用している。

各 n において、エッジを「0が割り当てられたエッジ」と「1以上が割り当てられたエッジ」に分けよう。このとき、以下の補題が成り立つ。

補題：ある n において、「1以上が割り当てられたエッジ」のみを通して i と j を結ぶことが出来ないとする。このとき、 $\hat{f}_n = 0$ である。

この補題は以下のように示せる。 h_0 は定数関数であることに注意する。「1以上が割り当てられたエッジ」のみを通して i と j を結ぶことが出来ないので、「0が割り当てられたエッジ」のみを境界として、 i を含む領域と j を含む領域とを分断することが出来る（図 49）。この分断境界をなすエッジの集合を B と書く。

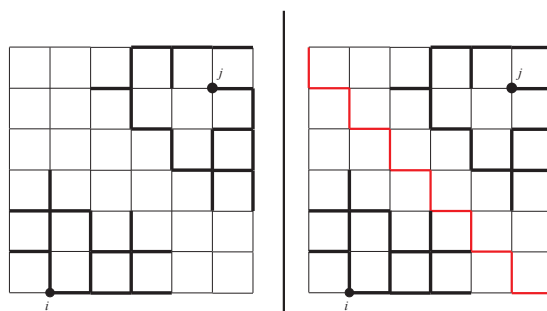


図 49: (左): 「1以上が割り当てられたエッジ」のみを通して i と j を結ぶことが出来ない状況の例。太線が1以上のエッジである。(右): この状況では、0のエッジだけで「 i の領域」と「 j の領域」を分断する境界 B (赤線) を作ることが出来る。

$\hat{f}_n = \mathbb{E}[f(\mathbf{J})h_n(\mathbf{J})]$ の右辺のランダム平均がどうなるかを考える。サンプルされた相互作用係数 \mathbf{J} について、 B 以外のエッジはそのままにして、 B に属するすべてのエッジ e の相互作用係数の符号を反転させたものを \mathbf{J}' とする。対称性より、 \mathbf{J} と \mathbf{J}' の出現確率密度は等しい。また、 B に属するエッジ e のエルミート多項式は h_0 と定数であり、エッジ e の相互作用係数 J_e への依存性を持たない。そのためエルミート多項式は

$$h_n(\mathbf{J}) = h_n(\mathbf{J}') \quad (19.59)$$

を満たす。一方、 \mathbf{J}' の系の基底状態 $\sigma^B(\mathbf{J}')$ は、元の基底状態 $\sigma^B(\mathbf{J})$ から、 B で区切られた一方領域のスピンをすべて反転させたものになる。そのため、

$$f(\mathbf{J}) = -f(\mathbf{J}') \quad (19.60)$$

である。これにより、 \mathbf{J} と \mathbf{J}' は同一確率で出現し、両者は一対一対応しており、 f の値は \mathbf{J} と \mathbf{J}' とでちょうど -1 倍の関係なので、欲しかった関係式

$$\hat{f}_n = \mathbb{E}[f(\mathbf{J})h_n(\mathbf{J})] = 0 \quad (19.61)$$

を得る。

ij 間の距離を d とすると、 $\hat{f}_n \neq 0$ であれば、少なくとも n は d 個の非ゼロ成分を持つ。さて、ここで $n \geq 1$ のエルミート多項式 $h_n(x)$ が、ガウス分布に対して平均ゼロ

$$\int dx h_n(x) \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{\pi}} = 0 \quad (19.62)$$

である点に注意する。この事実により、もし $h_n(\mathbf{J})$ に対し、 $n_e \geq 1$ であるエッジ e について、一つでもその相互作用係数 J_e をガウス分布からリサンプリングすることになると、リサンプリング後の $h_n(\tilde{\mathbf{J}})$ のリサンプリング平均はゼロになる。元々の相互作用係数が \mathbf{J} のときの、リサンプル後の関数 $f(\tilde{\mathbf{J}})$ のリサンプリング平均を $\tilde{\mathbb{E}}[f(\tilde{\mathbf{J}})|\mathbf{J}]$ と書くことにすると、 $f(\tilde{\mathbf{J}})$ は「 $n_e \geq 1$ であるエッジを一つでもリサンプリングするとゼロ」「 $n_e \geq 1$ であるどのエッジもリサンプリングしないと、元の値 $h_n(\mathbf{J})$ 」を取る³²⁰ という確率変数となるので、

$$\tilde{\mathbb{E}}[h_n(\tilde{\mathbf{J}})|\mathbf{J}] = (1-p)^{|\mathbf{n}|} h_n(\mathbf{J}) \quad (19.63)$$

が成り立つ。ただし $|\mathbf{n}|$ は \mathbf{n} 中のゼロでない成分の数を表している。

ではいよいよ、 \mathbf{J} と $\tilde{\mathbf{J}}$ の間の、二点相関のオーバーラップ $f(\tilde{\mathbf{J}})f(\mathbf{J}) = \sigma_i^B(\tilde{\mathbf{J}})\sigma_j^B(\tilde{\mathbf{J}})\sigma_i^B(\mathbf{J})\sigma_j^B(\mathbf{J})$ の期待値を評価しよう。今までに導いた性質を用いると

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\tilde{\mathbb{E}}[f(\tilde{\mathbf{J}})|\mathbf{J}]f(\mathbf{J})] &= \mathbb{E} \left[\tilde{\mathbb{E}} \left[\sum_{\mathbf{n}} \hat{f}_{\mathbf{n}} h_{\mathbf{n}}(\tilde{\mathbf{J}}) \middle| \mathbf{J} \right] \sum_{\mathbf{m}} \hat{f}_{\mathbf{m}} h_{\mathbf{m}}(\mathbf{J}) \right] \\ &= \mathbb{E} \left[\left(\sum_{\mathbf{n}} (1-p)^{|\mathbf{n}|} \hat{f}_{\mathbf{n}} h_{\mathbf{n}}(\mathbf{J}) \right) \sum_{\mathbf{m}} \hat{f}_{\mathbf{m}} h_{\mathbf{m}}(\mathbf{J}) \right] \\ &= \sum_{\mathbf{n}} (1-p)^{|\mathbf{n}|} \hat{f}_{\mathbf{n}}^2 \end{aligned} \quad (19.64)$$

と計算できる。ただし最後の等式では、ランダム平均 \mathbb{E} のガウス分布による確率重みがエルミート多項式の重み e^{-J^2} と一致することにより、 $\mathbb{E}[h_n(\mathbf{J})h_m(\mathbf{J})] = \delta_{nm}$ となることを用いている。

f が二点相関の場合、展開係数 $\hat{f}_{\mathbf{n}}$ の二乗和は $\sum_{\mathbf{n}} \hat{f}_{\mathbf{n}}^2 = \mathbb{E}[f(\mathbf{J})^2] = 1$ である。また補題1で示したように、 $\hat{f}_{\mathbf{n}}$ が非ゼロとなるためには、 \mathbf{n} の1以上のエッジをつたって i から j に行ける必要があるため、 $|\mathbf{n}|$ は必ず i と j の距離 $d(i, j)$ 以上である。よって上式の右辺はさらに

$$\sum_{\mathbf{n}} (1-p)^{|\mathbf{n}|} \hat{f}_{\mathbf{n}}^2 \leq (1-p)^{d(i, j)} \quad (19.65)$$

と上から評価できる。

よって、二つの基底状態 $\sigma^B(\mathbf{J})$ と $\sigma^B(\tilde{\mathbf{J}})$ のオーバーラップ R の二乗期待値は

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[R(p)^2] &= \frac{1}{V^2} \sum_{i, j} \mathbb{E}[\tilde{\mathbb{E}}[\sigma_i^B(\tilde{\mathbf{J}})\sigma_j^B(\tilde{\mathbf{J}})|\mathbf{J}]\sigma_i^B(\mathbf{J})\sigma_j^B(\mathbf{J})] \leq \frac{1}{V} \sum_j (1-p)^{d(i, j)} \\ &\leq \frac{1}{V} \sum_{d=1}^{\infty} (1-p)^d C d^{D-1} \end{aligned} \quad (19.66)$$

となる。ただし C は適当な定数である。最後の变形では、ある点から距離 d である点の個数を上から不等式評価している。任意の D と $p > 0$ について

$$\sum_{d=1}^{\infty} (1-p)^d C d^{D-1} < \infty \quad (19.67)$$

が示せる³²¹ ので、 $C \sum_{d=1}^{\infty} (1-p)^d C d^{D-1} = K(p, D)$ とすればこの量は定数である。つまり、この最右辺は少なくとも $1/V$ の速さで減衰する。□

19.7 <補論>応用：数値積分の補間法

直交多項式の少し変わった応用として、数値積分への利用を見てみよう。数値積分では積分を和に置き直す必要があるが、和に置き直す際の点の選び方の一つとして、直交多項式のゼロ点を用いるという「ガウス求積法 (Gaussian quadrature)」がある。その背後にあるのは以下の定理である。

³²⁰ $n_e = 0$ のエッジは、そもそも J_e 依存性を持っていないので、そのエッジの相互作用係数をリサンプリングしても h_n の値は変わらない点に注意。

³²¹ 示すべき結果は $\int_0^{\infty} dx (1-p)^x x^{D-1} = (-\ln(1-p))^{-D} \Gamma(D) < +\infty$ と本質的には変わらない。

定理 19.3 (ガウス公式³²²). $f(x)$ は $2n - 1$ 次以下の多項式とする。このとき、積分区間に合わせた n 次の直交多項式 $P_n(x)$ とその重み関数 $\rho(x)$ を用いて、

$$\int dx \rho(x) f(x) = \sum_{i=1}^n w_i \rho(x_i) f(x_i) \quad (19.68)$$

と書ける。ただし x_i は $P_n(x)$ の n 個のゼロ点であり、重み w_i は関数 $L_i(x) := \prod_{j(\neq i)} (x - x_j)$ を用いて

$$w_i := \int dx \frac{L_i(x)}{L_i'(x_i)} \quad (19.69)$$

で与えられる。

「積分区間に合わせた」とは、範囲が有限、半無限、無限にあわせて、ルジャンドル、ラゲール、エルミートの各多項式とその重み関数を用いるということである。積分したい関数 $g(x)$ が $\rho(x)$ で割り切れる場合には、 $f(x) = g(x)/\rho(x)$ と置けばよい。一般には、積分したい関数 $f(x)$ は多項式ではないが、一般の $f(x)$ についても、ガウス公式 (19.68) の右辺は左辺の良い近似になっていると考えられる。これは、 $f(x)$ の多項式近似と理解することができる。近似計算の場合には、 $\rho(x)f(x)$ を改めて $f(x)$ と見れば、 $\rho(x) = 1$ と置いた場合と同様のガウス公式での計算で近似式が得られる。

w_i の定義式の積分は、各直交多項式 $P_n(x)$ を用いて

$$w_i = \int dx \frac{P_i(x)}{(x - x_i)P_i'(x_i)} \quad (19.70)$$

と書き直すことができる。この積分は、古典的直交多項式の諸性質³²³ を使って計算することが出来、

$$w_i = \frac{2(1 - x_i^2)}{(nP_{n-1}(x_i))^2} \quad (\text{Legendre}) \quad (19.71)$$

$$w_i = \frac{x_i}{(n+1)^2(L_{n+1}(x_i))^2} \quad (\text{Laguerre}) \quad (19.72)$$

$$w_i = \frac{2^{n-1}n!\sqrt{\pi}}{n^2(H_{n-1}(x_i))^2} \quad (\text{Hermite}) \quad (19.73)$$

であることが知られている。なので、 w_i の積分は実際には実行する必要はない。

この公式の背後にあるのは、ラグランジュ補間という結果である。

定理 19.4 (ラグランジュ補間 (Lagrange interpolation)). $f(x)$ を $n - 1$ 次以下の多項式とする。このとき、任意の n 個の点 x_1, \dots, x_n を用いて、 $f(x)$ は以下のように書ける

$$f(x) = \sum_{i=1}^n f(x_i) \frac{L_i(x)}{L_i'(x_i)} \quad (19.74)$$

ラグランジュ補間は、点を取る位置は任意の代わりに、 $f(x)$ は $2n - 1$ 次ではなく $n - 1$ 次までと制限が強い。ガウス公式は倍の次数まで完璧な記述ができるため、ガウス公式の方が近似精度が向上している。

証明. 式 (19.74) 右辺を $g(x)$ と置く。 $g(x)$ は明らかに $n - 1$ 次多項式である。

また、 $L_i(x_j) = 0$ ($i \neq j$) より、すべての $1 \leq i \leq n$ について $g(x_i) = f(x_i)$ が成り立つ。よって $n - 1$ 次多項式が n か所で一致したので、両者は恒等的に一致する。すなわち $g(x) = f(x)$ である。□

³²²通常は、用いている直交多項式にあわせて「ガウス・ルジャンドル公式」「ガウス・ラゲール公式」「ガウス・エルミート公式」などと呼ぶ。

³²³古典的直交多項式では、各べきの係数間に非自明な関係式が成り立つので、それを利用する。

式 (19.68) の証明. 積分したい $2n - 1$ 次以下の多項式 $f(x)$ を $P_n(x)$ で割り、 $f(x) = p(x)P_n(x) + q(x)$ と書く。 $p(x)$ 、 $q(x)$ はともに $n - 1$ 次以下の多項式である点に注意する。

直交多項式の直交性より

$$\int dx \rho(x) f(x) = \int dx \rho(x) p(x) P(x) + \int dx \rho(x) q(x) = \int dx \rho(x) q(x) \quad (19.75)$$

が成り立つ。ラグランジュ補間をこの右辺に用いると、任意の n 点 x_1, \dots, x_n について、

$$\int dx \rho(x) q(x) = \sum_{i=1}^n \rho(x_i) q(x_i) \int dx \frac{L_i(x)}{L_i(x_i)} \quad (19.76)$$

が得られる。

一方、特に x_1, \dots, x_n を $P_n(x)$ のゼロ点とすると、すべての $1 \leq i \leq n$ で $f(x_i) = q(x_i)$ が成り立つ。以上をまとめると、

$$\int dx \rho(x) f(x) = \sum_{i=1}^n \rho(x_i) q(x_i) \int dx \frac{L_i(x)}{L_i(x_i)} = \sum_{i=1}^n \rho(x_i) f(x_i) \int dx \frac{L_i(x)}{L_i(x_i)} \quad (19.77)$$

となり、求めたかった結果を得る

□

20 超幾何関数

特殊関数のいわば親玉のような存在として、超幾何関数と呼ばれる関数がある。超幾何関数は、それ自体が微分方程式論や可積分系の分野の興味の対象として研究されるとともに、その特定の形は物理や応用数学などのさまざまな場所に姿を現す。超幾何関数は一般論で言えることも多いので、ここではその基本的性質を見ていくことにしよう³²⁴。個々の特殊関数特有の性質は、必要が生じたときに調べた方がよいので、ここでは詳しく扱わない³²⁵。

20.1 微分方程式の特異点

これまで、微分方程式というと実空間上の微分方程式を考えてきたであろうが、ここでは概念を複素空間に拡張する。関数は解析関数のクラスに限定したうえで、複素空間中の微分方程式を考える（ただし微分方程式そのものは実空間でも定義できるようにしたいので、係数は実数にとる）。特に、以下の形の二階線形微分方程式を考える。

$$f''(z) + a(z)f'(z) + b(z)f(z) = 0 \quad (20.1)$$

我々は特に、「特異点 (singularity point)」を持つ微分方程式に関心がある。関数 $f(z)$ が $z = a$ に特異点を持つとは、 $f(z)$ が $z = a$ で発散している（極を持つ）ことをいう。微分方程式 (20.1) が $z = a$ に特異点を持つとは、 $a(z)$ または $b(z)$ が $z = a$ で発散していることと定義する。

微分方程式の解 $f(z)$ が、特異点 $z = a$ 近傍で $f(z) \simeq (z - a)^l$ と振る舞っているとすると。この場合、 $f'(z) \sim (z - a)^{l-1}$ 、 $f''(z) \sim (z - a)^{l-2}$ なので、最も発散が速い主要項³²⁶ が $a(z) \sim (z - a)^{-1}$ 、 $b(z) \sim (z - a)^{-2}$ ならば、微分方程式の各項のべきは整合しており、そこまで異常な振る舞いは生じていない。一方、 $a(z)$ や $b(z)$ の発散速度がこれより早い場合には、単純に $f(z) \simeq (z - a)^l$ と置いても整合的にならず、異常性が強い。そこで、これらを区別してそれぞれ「確定特異点」、「不確定特異点」と呼ぶ。

定義 20.1 (確定特異点・不確定特異点). 微分方程式 (20.1) で、 $z = a$ が特異点であり、 $a(z)$ の極が一位、 $b(z)$ の極が二位までのとき、 $z = a$ は「確定特異点 (regular singularity point)」であるという。 $a(z)$ の極が p_a 位、 $b(z)$ の極が p_b 位で $\max(p_a, p_b/2) > 1$ のとき、 $z = a$ は $\max(p_a, p_b/2)$ 位の「不確定特異点 (irregular singularity point)」であるという

$z = \infty$ における特異性も通常議論の対象に含まれる。無限遠点を議論するには、 $z = \frac{1}{w}$ と変数変換して、 $w = 0$ における特異性を議論すればよい。 $g(w) = f(1/z)$ と置くと、

$$\frac{d}{dw} = \frac{dz}{dw} \frac{d}{dz} = -z^2 \frac{d}{dz} \quad (20.2)$$

を利用することで、

$$-z^2 f'(z) = g'(w) \quad (20.3)$$

$$-z^2 f''(z) = -\frac{d}{dw} f'(z) = \frac{d}{dw} (w^2 g'(w)) = 2wg'(w) + w^2 g''(w) \quad (20.4)$$

が得られる。よって、もともとの微分方程式 (20.1) は

$$g''(w) - \left(\frac{1}{w^2} a\left(\frac{1}{w}\right) - \frac{2}{w} \right) g'(w) + \frac{1}{w^4} b\left(\frac{1}{w}\right) g(w) = 0 \quad (20.5)$$

という微分方程式に書き直せる。この $w = 0$ における振る舞いを考察すればよい。

³²⁴本章の内容は、先述の立川さんの講義ノートのほかに、坂井秀隆『常微分方程式』東京大学出版会、H. ホックシタット『特殊関数——その理・工学への応用』培風館、原岡喜重『超幾何関数』朝倉書店などに基づく。

³²⁵例えばベッセル関数などは、それだけで一冊の本になるほどさまざまな性質が調べられているので、必要が生じた際にはそういう本を適宜見てもらいたい。特殊関数全般に幅広く色々出ている邦書としては、『岩波 数学公式』の特殊関数の巻などが有名である。ウェブで見れるものとしては、「特殊関数グラフィックスライブラリー」(<https://math-functions-1.watson.jp/index.html>)が、特殊関数のさまざまな可視化や、特殊関数の満たす色々な性質を網羅的に掲載している。

³²⁶例えば $b(z) = \frac{1}{z} + \frac{1}{z^2} + \frac{1}{z^3}$ の場合、発散の主要項は $\frac{1}{z^3}$ なので、 $b(z)$ の $z = 0$ における極は三位である。

[20-1]. n を固定した際のラゲールの微分方程式 (19.18) の特異点の位置とその位数を求めよ。

20.2 超幾何関数の導入

確定特異点という概念を導入したので、確定特異点を持つ微分方程式の考察を進めよう³²⁷。 $z = a$ に確定特異点を持つ (連立) 微分方程式は

$$\frac{d}{dz}X(z) = \frac{1}{z-a}A(z)X(z) \quad (20.6)$$

と書ける。ただし $A(z)$ は行列、 $X(z)$ はベクトルである。

これが $z = \infty$ で特異点となるかは、 $w = \frac{1}{z}$ の変換を施して

$$\frac{d}{dw}X\left(\frac{1}{w}\right) = -\frac{1}{w(1-aw)}A\left(\frac{1}{w}\right)X\left(\frac{1}{w}\right) \quad (20.7)$$

が $w = 0$ で特異点か否かを見ることで調べられる。

ではまず、2つの確定特異点を持つ1階の微分方程式を考えよう。この場合、 A と X はともに一変数、すなわちベクトルではなく数になる

ここで、 $A(z)$ がもし正のべき (z や z^3 など) を持つならば、 $w = 0$ ($z = \infty$) は不確定特異点になってしまう。同様に、 $A(z-a)$ がもし負のべきをもつならば、 $z = a$ は不確定特異点になってしまう。そのため、どちらの点も確定特異点となるためには、 $A(z)$ は定数でないといけない³²⁸。このときの微分方程式は

$$\frac{d}{dx}f(x) - \frac{b}{x-a}f(x) = 0 \quad (20.8)$$

である。これは簡単に解けて

$$f(x) = \frac{1}{(x-a)^b} \quad (20.9)$$

が解である。

さて、これは実は「幾何級数 (geometric series)」(を少し一般化したもの) である。幾何級数は、 $a = b = 1$ で符号を反転させた

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \quad (20.10)$$

というものである。以下で我々が調べる「超幾何級数」はこの一般化とも見れる。

先程の幾何級数の例から、微分方程式の階数を一つ上げ、確定特異点の数も一つ増やしたものが「超幾何微分方程式」である。

定義 20.2 (超幾何微分方程式). 特異点を3つ持ち、そのすべてが確定特異点であるような、二階の線形微分方程式を「超幾何微分方程式 (hypergeometric differential equation)」という。またその解を「超幾何関数 (hypergeometric function)」、その級数表示を「超幾何級数 (hypergeometric series)」という。

ひとまず超幾何微分方程式が定義できたが、このままではどんな微分方程式がよくわからない。なので以下、少しこの微分方程式の形を整理していこう。

複素平面全体 + 無限遠点は (無限遠が全て一点でつながっていると思うと) 球面と同相である。まず、球面から球面への一対一の正則関数を用いて、特異点の位置を動かす。実はこのような関数は、一次分数変換

$$z \rightarrow \frac{az+b}{cz+d} \quad (20.11)$$

³²⁷ 特異点がすべて確定特異点である、有理型の線形常微分方程式を「フックス型微分方程式 (Fuchsian equations)」という。

³²⁸ z のべきは $z-a$ のべきの形に書き直せる。

で表せることが知られている。ただし $ad - bc \neq 0$ とする。一次分数変換を用いれば、任意の与えられた 3 点を、それぞれ $z = 0, 1, \infty$ に移すことができる³²⁹。

[20-2]. $z = 2, 3, 4$ を $z = 0, 1, \infty$ に移す一次分数変換を与えよ。

$z = 0, 1$ に確定特異点を持つ二階線形微分方程式は一般に

$$f''(z) + \left(\frac{p_1(z)}{z} + \frac{p_2(z)}{z-1} \right) f'(z) + \left(\frac{q_1(z)}{z^2} + \frac{q_2(z)}{(z-1)^2} + \frac{q_3(z)}{z(z-1)} \right) f(z) = 0 \quad (20.12)$$

と書ける。複素平面上で他の特異点がないため、 p_i, q_i は整関数である。これが $z = \infty$ で確定特異点を持たないといけなないので、 $z \rightarrow \frac{1}{w}$ と変換すると

$$f''\left(\frac{1}{w}\right) + \frac{1}{w} \left(2 - p_1\left(\frac{1}{w}\right) - \frac{p_2(1/w)}{1-w} \right) f'\left(\frac{1}{w}\right) + \frac{1}{w^2} \left(q_1\left(\frac{1}{w}\right) + \frac{q_2(1/w)}{(1-w)^2} + \frac{q_3(1/w)}{1-w} \right) f\left(\frac{1}{w}\right) = 0 \quad (20.13)$$

となる。 $w = 0$ が確定特異点になるには、 p_i, q_i はすべて定数でないといけない。

$z \simeq 0$ 近傍では、解は $f(z) \sim z^a$ のようにふるまうはずである³³⁰。この解の形を式 (20.12) に代入して主要項のみ拾うと

$$a(a-1) + p_1a + q_1 = 0 \quad (20.14)$$

という二次方程式が得られるので、これを解くことで 2 つのべき a_{\pm} が得られる。同様に、 $z \simeq 1$ 近傍の解を $f(z) \sim (z-1)^b$ 、 $w \simeq 0$ 近傍の解を $f(w) \sim w^c$ と書くと、それぞれ

$$b(b-1) + p_2b + q_2 = 0 \quad (20.15)$$

$$c(c-1) + (2-p_1-p_2)c + q_1 + q_2 + q_3 = 0 \quad (20.16)$$

という二次方程式でべきが定まる。6 つのべき $a_{\pm}, b_{\pm}, c_{\pm}$ が得られたが、これらはすべて独立なパラメータではなく、二次方程式の解と係数の関係より

$$a_+ + a_- + b_+ + b_- + c_+ + c_- = (1-p_1) + (1-p_2) + (-1+p_1+p_2) = 1 \quad (20.17)$$

という制限が課されている。

微分方程式 (20.12) を、これらのべきを束ねて書いたもの

$$P \begin{pmatrix} 0 & 1 & \infty \\ a_+ & b_+ & c_+ & z \\ a_- & b_- & c_- \end{pmatrix} \quad (20.18)$$

と対応付ける表記をよく用いる。これを「リーマン図式 (Riemann scheme)」と呼ぶ。

ここでさらに、解の関数 $f(z)$ を少し変形し

$$g(z) = z^s(z-1)^t f(z) \quad (20.19)$$

という関数に対する微分方程式と捉え直してみよう。すると、この微分方程式に対するリーマン図式は

$$z^s(z-1)^t P \begin{pmatrix} 0 & 1 & \infty \\ a_+ & b_+ & c_+ & z \\ a_- & b_- & c_- \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} 0 & 1 & \infty \\ a_+ + s & b_+ + t & c_+ - s - t & z \\ a_- + s & b_- + t & c_- - s - t \end{pmatrix} \quad (20.20)$$

³²⁹ $z_1 \rightarrow 0, z_2 \rightarrow 1, z_3 \rightarrow \infty$ としたいならば、連立方程式 $az_1 + b = 0, cz_3 + d = 0, az_2 + b = cz_2 + d$ を解けばよい。なお、 a, b, c, d をすべて定数倍しても変換は同じなので、定数倍の任意性は残る。

³³⁰ より正確には、これに級数がかかった $z^a \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n$ の形である。

となる³³¹。そのため、特に

$$g(z) = z^{-a_+}(z-1)^{-b_+}f(z) \quad (20.21)$$

と変形すれば

$$z^{-a_+}(z-1)^{-b_+}P \begin{pmatrix} 0 & 1 & \infty \\ a_+ & b_+ & c_+ \\ a_- & b_- & c_- \end{pmatrix} z = P \begin{pmatrix} 0 & 1 & \infty \\ 0 & 0 & \alpha \\ 1-\gamma & \gamma-\alpha-\beta & \beta \end{pmatrix} z \quad (20.22)$$

と整理した形に書ける。ただし $\alpha = c_+ + a_+ + b_+$ 、 $\beta = c_- + a_+ + b_+$ 、 $\gamma = 1 - a_- + a_+$ と置いた。このリーマン図式のパラメータの置き方はよく用いられる。

式 (20.22) に対応する微分方程式は、

$$\left[z(z-1)\frac{d^2}{dz^2} - (\gamma - (\alpha + \beta + 1)z)\frac{d}{dz} + \alpha\beta \right] f(z) = 0 \quad (20.23)$$

であり、これは「ガウスの超幾何微分方程式」と呼ばれる。以上から明らかなように、すべての超幾何微分方程式はガウスの超幾何微分方程式に帰着できる。

定理 20.1 (ガウスの超幾何微分方程式). すべての超幾何微分方程式はガウスの超幾何微分方程式 (20.23) に帰着できる。

20.3 超幾何関数の3つの特徴づけ

超幾何関数には、微分方程式、級数表示、積分表示、という3つの表し方がある。既に微分方程式は式 (20.23) が得られているので、ここでは残りの二つがどのように表されるのか考察しよう。

まず級数表示から考えよう。微分方程式 (20.23) の解が $f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n$ とべき級数展開できているとする。すると、これを式 (20.23) に代入すると

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n n(n-1)(z^n - z^{n-1}) - c_n \gamma n z^{n-1} + c_n (\alpha + \beta + 1) n z^n + c_n \alpha \beta z^n = 0 \quad (20.24)$$

なので、 z^n での係数を取り出すと漸化式

$$c_{n+1} = \frac{(\alpha + n)(\beta + n)}{(n+1)(\gamma + n)} c_n \quad (20.25)$$

が得られる。そのため、「ポツホハマー記号 (Pochhammer symbol)」 $(a)_n := a(a+1)(a+2)\cdots(a+n-1)$ を導入すると

$$c_n = \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{n! (\gamma)_n} \quad (20.26)$$

と求まる。

定理 20.2 (超幾何級数 (hypergeometric series)). ガウスの超幾何微分方程式 (20.23) のべき級数解は

$$F(\alpha, \beta; \gamma; z) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{n! (\gamma)_n} z^n \quad (20.27)$$

で与えられる。これを「ガウスの超幾何級数」という。

³³¹ 少し粗雑な表記だが、解を $g(z) = z^s(z-1)^t f(z)$ と変換した際のリーマン図式の移り変わりをこのように書いている。

[20-3]. 関数 $f(u) = F(1, 1; 2; -u)$ を求めよ。

元の微分方程式 (20.23) が二階の微分方程式なのに、解が一つしか得られなかったことを疑問に思うかもしれない。これは、超幾何微分方程式において $z = 0$ が特異点であることによる。べき級数展開で導かれたのは、指数 0 の方の解であり、指数 $1 - \gamma$ の方の解は $z^{1-\gamma}g(z)$ という形を仮定して $g(z)$ をべき級数展開することで得られる。

これを進めるには、リーマン図式で考えるのが便利である。上記のように解の形を変形すると

$$z^{\gamma-1}P \begin{Bmatrix} 0 & 1 & \infty \\ 0 & 0 & \alpha & z \\ 1-\gamma & \gamma-\alpha-\beta & \beta \end{Bmatrix} = P \begin{Bmatrix} 0 & 1 & \infty \\ \gamma-1 & 0 & \alpha+1-\gamma & z \\ 0 & \gamma-\alpha-\beta & \beta+1-\gamma \end{Bmatrix} \quad (20.28)$$

となる。右辺は超幾何級数解 $F(\alpha+1-\gamma, \beta+1-\gamma; 2-\gamma; z)$ を伴う³³²ので、元の超幾何微分方程式 (20.23) のもう一つの解として

$$f(z) = z^{1-\gamma}F(\alpha+1-\gamma, \beta+1-\gamma; 2-\gamma; z) \quad (20.29)$$

が得られる。よって超幾何微分方程式 (20.23) の一般解は

$$f(z) = C_1F(\alpha, \beta; \gamma; z) + C_2z^{1-\gamma}F(\alpha+1-\gamma, \beta+1-\gamma; 2-\gamma; z) \quad (20.30)$$

であると分かる。

さて、リーマン図式を使うと、これら以外にも多数の解の表示を得ることができる。例えば

$$(1-z)^{\alpha+\beta-\gamma}P \begin{Bmatrix} 0 & 1 & \infty \\ 0 & 0 & \alpha & z \\ 1-\gamma & \gamma-\alpha-\beta & \beta \end{Bmatrix} = P \begin{Bmatrix} 0 & 1 & \infty \\ 0 & \alpha+\beta-\gamma & \gamma-\beta & z \\ 1-\gamma & 0 & \gamma-\alpha \end{Bmatrix} \quad (20.31)$$

という関係が成り立つので、

$$f(z) = (1-z)^{\alpha+\beta-\gamma}F(\gamma-\alpha, \gamma-\beta; \gamma; z) \quad (20.32)$$

という形の解が存在するはずである。もちろんこれは見た目が違うだけで、すべて上記の一般解 (20.30) に含まれるものである。解が増えたわけではない点に注意しておく。

このアイデアを敷衍すると、0 にする 2 か所のべきの選び方が 12 通り³³³、0 になった 2 か所それぞれについてべき展開が存在するので、合計で 24 通りの超幾何級数を用いた解の表示を得ることができる。これは「クンマー (Kummer) の 24 の解」と呼ばれる。(さすがに 24 個の解を入力するのは大変なので省略。具体系を知りたい人は教科書なりウェブなりを見ていただきたい)。

最後の積分表示は、級数表示から導出するのが簡便である。これを導くために、二つの関係式を利用する。一つは、ガンマ関数を用いたベータ関数の表示

$$B(p, q) = \int_0^1 dx x^{p-1}(1-x)^{q-1} = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)} \quad (20.33)$$

である。これは部分積分を繰り返すことで直接確認できる。もう一つは、幾何級数の派生式

$$\frac{1}{(1-x)^a} = 1 + ax + \frac{a(a+1)}{2}x^2 + \frac{a(a+1)(a+2)}{3!}x^3 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{n!}x^n \quad (20.34)$$

である。これらを利用すると、以下の積分表示が導ける。

³³² リーマン図式の一行目と二行目の区別には意味がないので適宜入れ替えてよい。

³³³ $z = \infty$ も適宜変数変換して 0 または 1 に動かせるので、 $z = \infty$ の一方のべきもゼロにすることができる。0, 1, ∞ の中から 2 つを選ぶ方法が 3 通り、選んで 2 つの中にそれぞれ 2 つのべきがあり、どちらを消すかがそれぞれ 2 通りあるので計 4 通り。これらをすべて掛けると 12 通りである。

定理 20.3 (オイラーの積分表示). ガウスの超幾何級数 (20.27) は

$$F(\alpha, \beta; \gamma; z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \int_0^1 ds s^{\alpha-1} (1-s)^{\gamma-\alpha-1} (1-zs)^{-\beta} \quad (20.35)$$

と積分表示できる。

証明. 以下の導出は、収束の関係から $\operatorname{Re}[\alpha] > 0$ 、 $\operatorname{Re}[\gamma - \alpha] > 0$ 、 $|z| < 1$ の条件下のものだが、解析接続することで極以外の任意の点に拡張可能である。

$(a)_j = \Gamma(a+j)/\Gamma(a)$ であることに注意すると

$$\begin{aligned} F(\alpha, \beta; \gamma; z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{n! (\gamma)_n} z^n \\ &= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+n)\Gamma(\gamma-\alpha)}{\Gamma(\gamma+n)} \frac{(\beta)_n}{n!} z^n \\ &= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\int_0^1 ds s^{\alpha+n-1} (1-s)^{\gamma-\alpha-1} \right) \frac{(\beta)_n}{n!} z^n \\ &= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \left(\int_0^1 ds s^{\alpha-1} (1-s)^{\gamma-\alpha-1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta)_n}{n!} (zs)^n \right) \\ &= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \int_0^1 ds s^{\alpha-1} (1-s)^{\gamma-\alpha-1} (1-zs)^{-\beta} \end{aligned} \quad (20.36)$$

と、求めたかった表示を得る。ただし最後の等式では式 (20.34) を用いた。 \square

[20-4]. 以下の「ガウスの超幾何定理」が成り立つことを示せ。ただし収束性の問題についてはひとまず気にしなくてよい³³⁴。

$$F(\alpha, \beta; \gamma; 1) = \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma-\alpha-\beta)}{\Gamma(\gamma-\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)} \quad (20.37)$$

20.4 合流操作

ここまで、3つの確定特異点を持つ二階の線形微分方程式を見てきた。ここでは、これを利用して不確定特異点を持つ微分方程式を作りたい。アイデアは非常にシンプルで、2つの確定特異点（位数1の特異点）を同じ場所に運んでくっつけば、位数2の不確定特異点になる、というものである。このような操作を「合流 (confluence)」という。

以下具体例で説明する。ガウスの超幾何微分方程式 (20.23) において、 $z = \tilde{z}/\beta$ と変数変換すると、 \tilde{z} は $0, \beta, \infty$ の3か所に確定特異点を持つ。すると、 $\beta \rightarrow \infty$ 極限を取れば、 \tilde{z} は0に確定特異点、 ∞ に位数2の不確定特異点を持つようになる。これが合流操作である。

記号を増やしたくないので、以下 \tilde{z} を改めて z と書き直して記述を進める。 $z \rightarrow z/\beta$ の変数変換を施したガウスの超幾何微分方程式は

$$\beta \left[z \left(\frac{z}{\beta} - 1 \right) \frac{d^2}{dz^2} - \left(\gamma - \left(1 + \frac{\alpha+1}{\beta} \right) z \right) \frac{d}{dz} + \alpha \right] f(z) = 0 \quad (20.38)$$

となる。この $\beta \rightarrow \infty$ 極限をとって得られるのが、「クンマーの合流型超幾何微分方程式」である。

³³⁴収束性の関係で、関係式が成り立つ条件として、「 γ は0以下の整数ではない」「 α または β は0以下の整数」、または「 $\operatorname{Re}[\alpha + \beta] < \operatorname{Re}[\gamma]$ 」「 $\operatorname{Re}[\gamma - \alpha - \beta] > 0$ 」がすべて満たされる必要がある。

定義 20.3 (クンマーの合流型超幾何微分方程式 (Kummer's confluent hypergeometric differential equation)). 以下の微分方程式

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + (\gamma - z) \frac{d}{dz} - \alpha \right] f(z) = 0 \quad (20.39)$$

は、 $z = 0$ に確定特異点を、 $z = \infty$ に位数 2 の不確定特異点を持つ。これを「クンマーの合流型超幾何微分方程式」と呼ぶ。

さらにクンマーの合流型超幾何微分方程式に対し、 $z \rightarrow (1/s^2) + z/s$ 、 $\gamma = 1/s^2$ という変数変換を行う。すると方程式は

$$\left[(1 + sz) \frac{d^2}{dz^2} - z \frac{d}{dz} - \alpha \right] f(z) = 0 \quad (20.40)$$

となり、確定特異点が $z = -1/s$ 、不確定特異点が $z = \infty$ となる。これに対して $s \rightarrow 0$ 極限を取れば³³⁵、特異点は $z = \infty$ における位数 3 の不確定特異点ただ一つとなる微分方程式が得られる。

定義 20.4 (エルミート・ウェーバー方程式 (Hermite-Weber equation)). 以下の微分方程式

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} - z \frac{d}{dz} - \alpha \right] f(z) = 0 \quad (20.41)$$

は、 $z = \infty$ に位数 3 の不確定特異点を持つ。これを「エルミート・ウェーバー方程式」と呼ぶ。

式 (20.41) は、適当な変数変換でエルミートの微分方程式 (19.17) にできることが確認できる。また、 $f(z) \rightarrow e^{z^2/4} f(z)$ と置くと、1 階微分の項が消えて

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} - \frac{z^2}{4} - \alpha + \frac{1}{2} \right] f(z) = 0 \quad (20.42)$$

が得られる。これは既に見た、量子力学の調和振動子のシュレディンガー方程式そのものの形である。

これらの方程式の不確定特異点に対し、さらに極限操作を施すことで、新たな微分方程式を得ることができる。これらは特異点の合流とは少し異なる極限操作である³³⁶。

クンマーの合流型超幾何微分方程式において、 $z \rightarrow z/\alpha$ と置くと

$$\left[\alpha z \frac{d^2}{dz^2} + (\gamma\alpha - z) \frac{d}{dz} - \alpha \right] f(z) = 0 \quad (20.43)$$

となる。ここにおいて全体を α で割って $\alpha \rightarrow \infty$ 極限をとると、 ${}_0F_1$ 微分方程式が得られる³³⁷。

定義 20.5 (${}_0F_1$ 微分方程式とベッセルの微分方程式 (Bessel's differential equation)). 以下の微分方程式

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + \gamma \frac{d}{dz} - 1 \right] f(z) = 0 \quad (20.44)$$

は、 $z = 0$ に確定特異点を、 $z = \infty$ に位数 3/2 の不確定特異点を持つ。これを「 ${}_0F_1$ 微分方程式」と呼ぶ。

³³⁵ $z = -\infty$ と $z = \infty$ は $w = 1/z$ の変換の下では同じ点になることに注意。

³³⁶ だが、より抽象的なレベルで見れば、合流と統一的に眺められる極限操作であることも知られている。木村弘信「一変数特殊関数再訪」数理解析研究所講究録 919 巻 1995 年 1-11 またこの視点で眺めることにより、ガウスの超幾何関数から始まる特殊関数の系列はこの 5 種類で尽きていることも確認できる。

³³⁷ 坂井秀隆『常微分方程式』東京大学出版会の呼び方に従ったが、あまり一般的なものではないと思う。

これを $z \rightarrow -s^2/4$ 、 $f(z) = s^k g(s)$ 、 $k = 1 - \gamma$ と置き直すと

$$\left[s^2 \frac{d^2}{ds^2} + s \frac{d}{ds} + (s^2 - k^2) \right] g(s) = 0 \quad (20.45)$$

が得られる。これを「ベッセルの微分方程式」と呼ぶ。

また、エルミート・ウェーバー方程式と等価な式 (20.42) において、 $z \rightarrow (2/\varepsilon^3) + \varepsilon z$ 、 $\alpha = 1/2 - 1/\varepsilon^6$ と置くと

$$\left[\frac{1}{\varepsilon^2} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{z}{\varepsilon^2} - \frac{\varepsilon^2 z^2}{4} \right] f(z) = 0 \quad (20.46)$$

となる。これに対し、全体に ε^2 をかけて $\varepsilon \rightarrow 0$ 極限をとると、エアリーの微分方程式が得られる。

定義 20.6 (エアリーの微分方程式 (Airy's differential equation))。以下の微分方程式

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} - z \right] f(z) = 0 \quad (20.47)$$

は $z = \infty$ に位数 $5/2$ の不確定特異点を持つ。これを「エアリーの微分方程式」と呼ぶ。

合流で得られる関数を整理すると図 50 のようになる。

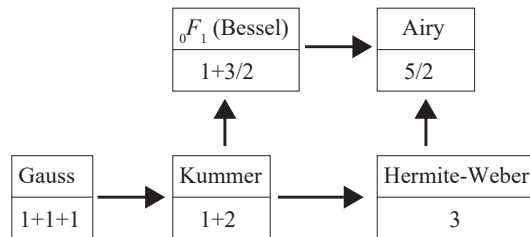


図 50: 合流でどの関数が得られるのかをまとめたもの。下の $1+2$ のような数字は、特異点の数とその位数を表す。

[20-5]. ${}_0F_1$ 微分方程式において、関数を $f(z) \rightarrow z^{-\gamma/2} f(z)$ と置き直したうえで、変数変換 $z \rightarrow (1/\varepsilon^3) + z/\varepsilon^2$ 、 $\gamma = 2\varepsilon^{-3/2}$ を行って $\varepsilon \rightarrow 0$ 極限をとると、合流が生じてエアリーの微分方程式が得られることを示せ。

追加の極限操作で何が起きているのか、もう少し詳しく見てみよう。 ${}_0F_1$ 微分方程式について、極限をとる前 (式 (20.43)) ととった後 (式 (20.44)) とで、 $w = 1/z$ と置き替えた微分方程式はそれぞれ

$$\left[-2\alpha \frac{d^2}{dw^2} + \left(\frac{1}{w^2} - \frac{2\alpha}{w} - \frac{\gamma\alpha}{w} \right) \frac{d}{dw} - \alpha \frac{1}{w^3} \right] f(w) = 0 \quad (20.48)$$

$$\left[-2 \frac{d^2}{dw^2} - \left(\frac{2}{w} + \frac{\gamma}{w} \right) \frac{d}{dw} - \frac{1}{w^3} \right] f(w) = 0 \quad (20.49)$$

である。クンマーの超幾何微分方程式 (20.48) では、1階微分と0階微分の係数の $w = 0$ での位数はそれぞれ 2 と 3 なので、微分方程式全体の位数は $\max(2, 3/2) = 2$ である。一方、 ${}_0F_1$ 微分方程式 (20.49) では、1階微分と0階微分の係数の $w = 0$ での位数はそれぞれ 1 と 3 なので、微分方程式全体の位数は $\max(1, 3/2) = 3/2$ である。

同様に、エアリーの微分方程式について、極限をとる前 ((20.46)) ととった後 ((20.47)) とで、 $w = 1/z$

と置き替えた微分方程式はそれぞれ

$$\left[-\frac{1}{\varepsilon^2} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{2}{\varepsilon^2 w} \frac{d}{dw} - \frac{1}{\varepsilon^2 w^5} - \frac{\varepsilon^2}{4w^6} \right] f(w) = 0 \quad (20.50)$$

$$\left[-\frac{d^2}{dw^2} - \frac{2}{w} \frac{d}{dw} - \frac{1}{w^5} \right] f(w) = 0 \quad (20.51)$$

である。エルミート・ウェーバー方程式 (20.50) では、1 階微分と 0 階微分の係数の $w = 0$ での位数はそれぞれ 1 と 6 なので、微分方程式全体の位数は $\max(1, 6/2) = 3$ である。一方、エアリーの微分方程式 (20.51) では、1 階微分と 0 階微分の係数の $w = 0$ での位数はそれぞれ 1 と 5 なので、微分方程式全体の位数は $\max(1, 5/2) = 5/2$ である。

超幾何関数には、微分方程式以外にも級数表示と積分表示という表示があった。合流型についても同様に級数表示と積分表示がある。

例えば、ガウスからクンマーへの極限を級数表示でとれば

$${}_1F_1(\alpha; \gamma; z) := \lim_{\beta \rightarrow \infty} F(\alpha, \beta; \gamma; \frac{z}{\beta}) := \sum_{n=0}^{\infty} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{n! (\gamma)_n} \frac{z^n}{\beta^n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n}{n! (\gamma)_n} z^n \quad (20.52)$$

が得られる。ただし $\lim_{\beta \rightarrow \infty} (\beta)_n / \beta^n = 1$ を用いた。同様にして、 ${}_0F_1$ 微分方程式の解の級数表示、

$${}_0F_1(\gamma; z) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! (\gamma)_n} z^n \quad (20.53)$$

も得られる。

[20-6]. クンマーの超幾何微分方程式 (20.39) の一つの解は ${}_1F_1(\alpha; \gamma; z)$ である。もう一つの解を ${}_1F_1$ を用いて表せ。

積分表示も、同様にして極限を取れば得られる。例えば、ガウスからクンマーの場合ならば、

$$\begin{aligned} F(\alpha, \gamma; z) &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} F(\alpha, \beta; \gamma; \frac{z}{\beta}) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \int_0^1 ds s^{\alpha-1} (1-s)^{\gamma-\alpha-1} \left(1 - \frac{sz}{\beta}\right)^{-\beta} \\ &= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \int_0^1 ds s^{\alpha-1} (1-s)^{\gamma-\alpha-1} e^{sz} \end{aligned} \quad (20.54)$$

と、簡単に書き直すことができる。

前の章で見た 3 つの古典的直交多項式も、これらの超幾何関数または合流型超幾何関数を用いて表せる。エルミート多項式は、すでに見たようにエルミート・ウェーバー方程式 (20.41) と本質的に等価であり、 $z = \infty$ に位数 3 の不確定特異点を持つ。ヤコビ多項式はガウスの超幾何関数で、ラゲール陪多項式はクンマーの合流型超幾何関数で、それぞれ以下のように表せる³³⁸。

$$J_n(x) = \binom{n+a}{n} \cdot F(-n, n+a+b+1; a+1; \frac{1-x}{2}) \quad (20.55)$$

$$L_n(x) = (-1)^a \frac{(\Gamma(n))^2}{\Gamma(a)\Gamma(n-a)} {}_1F_1(a-n, a+1; x) \quad (20.56)$$

ベッセルの微分方程式やエアリーの微分方程式、あるいは前章のエルミートの微分方程式や（ヤコビ多項式の特別な場合の）ルジャンドルの微分方程式は、物理や応用数学の色々なところに（変数変換をすることで）顔を出す。また、こうした微分方程式の解である特殊関数は、その特殊関数特有のさまざまな漸化式、加法定理、積分表示、漸近展開公式などを持つ³³⁹。しかし、そうした個別の性質は、実際に必要が生じた

³³⁸ これらの超幾何級数は $(-n)_m$ や $(a-n)_m$ のような項を和の分子に含むため、ある大きさ以上の m では値がすべてゼロとなり、有限次数の多項式となる。

³³⁹ ベッセル関数については、式 (20.45) の k が整数や半整数の場合に限って成り立つ関係式なども多い。

ときに必要な事柄について調べた方が明らかに有用なので、ここでは「調べれば色々出てくる可能性がある」という事実だけを頭に止めておいてもらい、それ以上の深入りはしないことにする。

20.5 隣接関係と変換公式

ある超幾何関数についての性質が分かったときに、それと似た超幾何関数についても、同じような性質を持っているのではないかと期待するのは自然である。超幾何関数の「隣接関係 (contiguity relation)」とは、ある超幾何関数とそれから一つの引数だけ ± 1 変化させた超幾何関数 (たち) を結び付ける関係式である。また、「 \sim 次変換公式」とは、超幾何関数の変数 z を n 次式に変換した場合の超幾何関数を、引数 z の超幾何関数で表す関係式である。

こうした超幾何関数の満たす関係式は非常に膨大なので、どういう関係式があるのかを見るために、ここではそのほんの一部だけをを紹介する。そうした関係式を集めた文献³⁴⁰ はいろいろあるので、必要が生じた際にはそうした文献を見れば有益な関係式が得られるかもしれない、ということだけ頭に置いておけばよい。

まず隣接関係から考えよう。これを説明するため、 $D := z \frac{d}{dz}$ という記号を導入する。すると、

$$(D + \alpha)F(\alpha, \beta; \gamma; z) = \sum_{n=0}^{\infty} (n + \alpha) \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{n! (\gamma)_n} z^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha(\alpha + 1)_n (\beta)_n}{n! (\gamma)_n} z^n = \alpha F(\alpha + 1, \beta; \gamma; z) \quad (20.57)$$

という微分を用いた隣接関係が得られる。ここで $(n + \alpha)(\alpha)_n = \alpha(\alpha + 1)(\alpha + 2) \cdots (\alpha + n - 1)(\alpha + n) = \alpha(\alpha + 1)_n$ を用いた。

微分を用いない場合には、3つの超幾何関数の間の関係式が得られる。例えば、以下のような関係式が成り立つことが知られている。

$$\gamma(1 - z)F(\alpha, \beta; \gamma; z) - \gamma F(\alpha, \beta - 1; \gamma; z) + (\gamma - \alpha)zF(\alpha, \beta; \gamma + 1; z) = 0 \quad (20.58)$$

証明は、左辺の z^n の係数を書き出すと

$$\begin{aligned} & \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{(\gamma + 1)_{n-1}} \left(\frac{1}{n!} - \frac{1}{(n-1)!} \frac{\gamma + n - 1}{(\alpha + n - 1)(\beta + n - 1)} - \frac{\beta - 1}{\beta + n - 1} \frac{1}{n!} + (\gamma - \alpha) \frac{1}{(n-1)!} \frac{1}{(\alpha + n - 1)(\beta + n - 1)} \right) \\ &= \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{(\gamma + 1)_{n-1}} \left(\frac{n}{\beta + n - 1} \frac{1}{n!} + \frac{1}{(n-1)!} \frac{-\alpha - n + 1}{(\alpha + n - 1)(\beta + n - 1)} \right) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (20.59)$$

とゼロになることから示せる。ガウスはこのような隣接関係を 15 個見つけている。これらを利用して、さらに新しい隣接関係を見つけることも出来る。

次に、変数 z を変換する場合の変換公式を見よう。これは、級数表示、積分表示、微分方程式表示など、色々な方法を用いて様々な関係式が導ける。次数ごとの変換のリストも導かれている³⁴¹。

ここでは、ガウスの超幾何微分方程式 (20.23) を出発点にして二次変換公式の一つ導出してみよう。 $\gamma = (\alpha + \beta + 1)/2$ と置くと

$$\left[z(z-1) \frac{d^2}{dz^2} - \frac{\alpha + \beta + 1}{2} (1-2z) \frac{d}{dz} + \alpha\beta \right] f(z) = 0 \quad (20.60)$$

という微分方程式が得られる。 $F(\alpha, \beta; \frac{\alpha + \beta + 1}{2}; z)$ はこの解のうち、 $z = 0$ が特異点とならないものである。

³⁴⁰ 例えば H. Bateman and A. Erdélyi, *Higher Transcendental Functions*, McGraw-Hill Inc. (1953) など。

³⁴¹ ネットで読める日本語で解説した記事としては、子葉「超幾何関数の変換」(<https://www.dropbox.com/s/lia8t19srg511hy/hypergeometric.pdf?dl=0>) がある。

ここで、 $y = 4z(1 - z)$ という変数変換を行うと、

$$\frac{df}{dz} = \frac{dy}{dz} \frac{df}{dy} = 4(1 - 2z) \frac{df}{dy} = 4\sqrt{1 - y} \frac{df}{dy} \quad (20.61)$$

$$\frac{d^2f}{dz^2} = \frac{d}{dz} \left(4(1 - 2z) \frac{df}{dy} \right) = 16(1 - y) \frac{d^2f}{dy^2} - 8 \frac{df}{dy} \quad (20.62)$$

と z 微分を y 微分に書き換えられる。これらを式 (20.60) に代入して全体を 4 で割ると

$$\left[y(y - 1) \frac{d^2}{dy^2} - \left(\frac{\alpha + \beta + 1}{2} - \left(\frac{\alpha + \beta}{2} + 1 \right) y \right) \frac{d}{dy} - \frac{\alpha\beta}{4} \right] f(y) = 0 \quad (20.63)$$

と、再び超幾何微分方程式が得られる。 $y = 0$ が特異点にならない解は $F\left(\frac{\alpha}{2}, \frac{\beta}{2}; \frac{\alpha + \beta + 1}{2}; y\right) = F\left(\frac{\alpha}{2}, \frac{\beta}{2}; \frac{\alpha + \beta + 1}{2}; 4z(1 - z)\right)$ である。これは元々の微分方程式 (20.60) の解と一致しないといけないので

$$F(\alpha, \beta; \frac{\alpha + \beta + 1}{2}; z) = F\left(\frac{\alpha}{2}, \frac{\beta}{2}; \frac{\alpha + \beta + 1}{2}; 4z(1 - z)\right) \quad (20.64)$$

という二次変換公式が成り立つことが分かる。

20.6 応用：誤差関数

大体の級数展開可能な関数は、超幾何関数、超幾何級数を用いれば記述することができる。一つの例として、誤差関数を書き下してみよう。

「誤差関数 (error function)」とは、ガウス分布の $[-x, x]$ の領域の面積

$$\operatorname{erf}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x dt e^{-t^2} \quad (20.65)$$

のことである。これと本質的に同一な「相補誤差関数 (complementary error function)」は、ガウス分布のテール部分の面積

$$\operatorname{erfc}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty dt e^{-t^2} \quad (20.66)$$

で定義される。これらは初等関数の範囲では書き下せないことが知られている³⁴² が、超幾何関数を用いれば記述することができる。

まず誤差関数の積分中の e^{-t^2} を級数展開し、項ごとに積分を実行することで、

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x dt \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n t^{2n}}{n!} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{n!(2n+1)} \quad (20.67)$$

という級数展開が得られる。さらにこれに e^{x^2} を掛けて変形を進めると

$$e^{x^2} \operatorname{erf} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} x^{2m} \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{n!(2n+1)} \right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\sum_{l=0}^k \frac{(-1)^l}{l!(2l+1)(k-l)!} \right) x^{2k+1} \quad (20.68)$$

が得られる。二つ目の等式では $k = n + m$ として k の和をとった。このカッコ内の和は

$$\sum_{l=0}^k \frac{(-1)^l}{l!(2l+1)(k-l)!} = \frac{1}{k!} \sum_{l=0}^k \frac{(-1)^l}{2l+1} \binom{k}{l} = \frac{1}{k!} \int_0^1 dx (1 - x^2)^k = \frac{1}{k!} \int_0^{\pi/2} d\theta \cos^{2k+1} \theta = \frac{1}{k!} \frac{(2k)!!}{(2k+1)!!} \quad (20.69)$$

³⁴²不定積分 $\int dt e^{-t^2}$ が初等関数の範囲内で解けないことが証明されている。

と計算できる。ただし $n!! = n(n-2)(n-4)\dots$ は一つ飛ばしの階乗記号である。最後の三角関数のべき乗の積分はよく知られたものである³⁴³。これを代入したうえで $(2k)!!/k! = 2^k$ を用いると、誤差関数は

$$\operatorname{erf} x = e^{-x^2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^k}{(2k+1)!!} x^{2k+1} = e^{-x^2} \frac{2x}{\sqrt{\pi}} {}_1F_1(1, 3/2; x^2) \quad (20.70)$$

と、合流型超幾何関数を用いて書ける。

ちなみに、誤差関数と相補誤差関数は、二階線形微分方程式

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + 2x \frac{d}{dx} \right] f(x) = 0 \quad (20.71)$$

の二つの解でもある。このことは、

$$\frac{d}{dx} \operatorname{erf}(x) = \frac{d}{dx} \operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \quad (20.72)$$

であることから直ちに確認できる。

³⁴³ $I_n = \int d\theta \cos^n \theta$ とすると、 $\int d\theta \cos^n \theta = \int d\theta \cos^{n-2} \theta (1 - \sin^2 \theta) = I_{n-2} - \left[-\frac{\cos^{n-1} \theta}{n-1} \sin \theta \right]_0^{\pi/2} - \int d\theta \frac{\cos^n \theta}{n-1}$ より $I_n = \frac{n-1}{n} I_{n-2}$ が得られる。これを繰り返し用いることでこの表示式を得る。

21 楕円関数

この章では、超幾何関数と並んで重要な特殊関数の一群である、楕円関数を取り扱う。楕円関数は、複素関数論の枠組で議論が展開されることが多いが、同時に力学の問題から整数論など³⁴⁴ まで幅広い応用を持つ³⁴⁵。

21.1 楕円積分とヤコビの楕円関数

楕円関数は、三角関数のある種の拡張として導入できる。よく知られているように、三角関数の逆関数は積分表示できる。すなわち

$$y = \int_0^x \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} \quad (21.1)$$

$$\rightarrow x =: \sin y \quad (21.2)$$

という関係が成り立つ。そこでこれを少し一般化して

$$y = \int_0^x \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}} \quad (21.3)$$

$$\rightarrow x =: \operatorname{sn} y \quad (21.4)$$

で関数 sn を定義する³⁴⁶。これを「ヤコビの楕円関数 (Jacobi elliptic functions)」という。ヤコビの楕円関数は本当はパラメータ k に依存している。それを明示する際には $\operatorname{sn}(y, k)$ のように書く。

三角関数は \sin 以外に \cos などがあるが、それと同様にヤコビの楕円関数にも sn 以外に

$$\operatorname{cn} y = \sqrt{1 - \operatorname{sn}^2 y} \quad (21.5)$$

$$\operatorname{dn} y = \sqrt{1 - k^2 \operatorname{sn}^2 y} \quad (21.6)$$

などがある^{347 348}。 $k = 0$ のときにはヤコビの楕円関数は通常の三角関数に一致する。

$$\operatorname{sn}(x, 0) = \sin x \quad (21.9)$$

$$\operatorname{cn}(x, 0) = \cos x \quad (21.10)$$

$$\operatorname{dn}(x, 0) = 1 \quad (21.11)$$

³⁴⁴例えば、 n が五角数 ($n = k(3k+1)/2$ と表せる和) でない限り、「 n を偶数個の相異なる正整数の和で表す方法」と「 n を奇数個の相異なる正整数の和で表す方法」の場合の数は一致するという「オイラーの五角数定理」や、すべての自然数は高々4個の平方数の和で表せるという「ラグランジュの四平方定理」などが、楕円関数（正確には、それと密接に関連したテータ関数）を用いて証明出来る。また、五次方程式には四則演算とべき根を用いた解の公式は存在しないことはよく知られているが、上記テータ関数を用いた解の公式も存在する。

³⁴⁵楕円関数について書いてある教科書・テキストとしては、ヤコビの楕円関数という具体的な関数を中心に考察するものと、複素関数論の観点から抽象的に楕円関数を議論するものとの、大きく分けることが出来る。前者の教科書としては、戸田盛和『楕円関数入門』日本評論社、後者の教科書としては梅村浩『楕円関数論 楕円曲線の解析学』東京大学出版会、エリアス・スタイン、ラミ・シャカルチ『複素解析 (プリンストン解析学講義 II)』日本評論社の第9, 10章などがある。オンラインテキストとしては、森田健「楕円関数論」(<https://fuchino.ddo.jp/yatsugatake/ellipticx.pdf>)、Scientific Doggie 管理人「楕円関数と楕円積分」(<http://www.wannyan.net/scidog/ellipse/ellipse.pdf>) などが、両方の視点にまたがって解説している。

³⁴⁶ sn は「エスエヌ」と読む。

³⁴⁷ cn や dn も、 sn のような積分の逆関数で定義することも出来る。 $k' = \sqrt{1-k^2}$ を用いて、それぞれ

$$y = \int_x^1 \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(k'^2+k^2t^2)}} \rightarrow x = \operatorname{cn} y \quad (21.7)$$

$$y = \int_x^1 \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(t^2-k'^2)}} \rightarrow x = \operatorname{dn} y \quad (21.8)$$

と書ける。

³⁴⁸順に「シーエヌ」「ディーエヌ」と読む。

これを見ると、sn, cn がそれぞれ sin, cos の一般化に対応しており、dn は半徑に対応していると見ることができる。

ここまでの説明では、なぜこれらの関数が「楕円」関数と呼ばれるのか、よく分からなかったと思う。これが楕円関数と呼ばれるのは、sn の定義に現れた積分が「楕円積分」と呼ばれているからである。

x 及び x の多項式 $p(x)$ の平方根を用いた有理式 f の積分

$$\int f(x, \sqrt{p(x)}) dx \quad (21.12)$$

を考えよう。 $p(x)$ が一次または二次のときは、この積分は初等関数の範囲で実行できるが、それより高次の場合は一般には初等関数の範囲では積分できない。特に $p(x)$ が三次または四次のときのこの積分を「楕円積分 (elliptic integral)」という。楕円積分は変数変換により、以下の3つのどれかに帰着できることが知られている³⁴⁹。

$$F(x, k) := \int_0^x \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}} \quad (21.13)$$

$$E(x, k) := \int_0^x \sqrt{\frac{1-k^2t^2}{1-t^2}} dt \quad (21.14)$$

$$\Pi(a; x, k) := \int_0^x \frac{dt}{(1-at^2)\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}} \quad (21.15)$$

これら3つの積分を、順に第1種、第2種、第3種の楕円積分と呼ぶ。またこの形の積分の表示を「ヤコビの標準形 (Jacobi normal form)」と呼ぶ。ヤコビの楕円関数 sn は、第1種楕円積分の逆関数として定義されている。

$t = \sin \theta$ と変数変換することで、ヤコビの標準形は以下の「ルジャンドルの標準形」に書き換えられる。

$$F(\phi, k) := \int_0^\phi \frac{d\theta}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \theta}} \quad (21.16)$$

$$E(\phi, k) := \int_0^\phi \sqrt{1-k^2 \sin^2 \theta} d\theta \quad (21.17)$$

$$\Pi(a; \phi, k) := \int_0^\phi \frac{d\theta}{(1-a \sin^2 \theta)\sqrt{1-k^2 \sin^2 \theta}} \quad (21.18)$$

特に $\phi = \frac{\pi}{2}$ としたものを「完全楕円積分」という。

さて、長径1、短径 k の楕円

$$x^2 + \frac{y^2}{k^2} = 1 \quad (21.19)$$

の $x = 0$ から $x = x'$ までの周長を計算しよう。曲線の長さの公式 $L = \int \sqrt{1 + (dy/dx)^2} dx$ を用いると、

$$L = \int_0^{x'} \sqrt{1 + \left(\frac{kt}{\sqrt{1-t^2}}\right)^2} dt = \int_0^{x'} \sqrt{\frac{1-(1-k^2)t^2}{1-t^2}} dt = \int_0^{x'} \sqrt{\frac{1-k'^2t^2}{1-t^2}} dt \quad (21.20)$$

と第2種楕円積分の形になる。ただし $k' = \sqrt{1-k^2}$ と置いた。これが「楕円」積分の名前の由来である。ただ、楕円の周長と結びつくのは第2種楕円積分なのに対し、ヤコビの楕円関数は第1種楕円積分を用いて定義されるので、ヤコビの楕円関数と楕円との結びつきは強くなく、呼び名は慣習的なものだと思っておいた方がいい。

21.2 ヤコビの楕円関数の基本性質

ここからは、ヤコビの楕円関数及び楕円積分が持つ性質を見ていこう。

³⁴⁹これは $p(x)$ が三次であるか四次であるかによらない。

微分

楕円積分 $y = F(x, k)$ ($x = \operatorname{sn} y$) を x 微分すると

$$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{\sqrt{(1-x^2)(1-k^2x^2)}} = \frac{1}{\sqrt{(1-\operatorname{sn}^2 y)(1-k^2\operatorname{sn}^2 y)}} = \frac{1}{\operatorname{cn} y \operatorname{dn} y} \quad (21.21)$$

が成り立つ。よって sn の微分は

$$\frac{d}{dy} \operatorname{sn} y = \frac{dx}{dy} = \operatorname{cn} y \operatorname{dn} y \quad (21.22)$$

と書けることが分かる。 cn と dn は sn を用いて書けるので、これらの微分も容易に求まる。結果を記すと

$$\frac{d}{dy} \operatorname{cn} y = -\operatorname{sn} y \operatorname{dn} y \quad (21.23)$$

$$\frac{d}{dy} \operatorname{dn} y = -k^2 \operatorname{sn} y \operatorname{cn} y \quad (21.24)$$

である。

[21-1]. cn の微分の式を導け。

加法定理

三角関数は、加法定理 $\sin(x+y) = \sin x \cos y + \sin y \cos x$ を満たす。これと同様に、ヤコビの楕円関数も加法定理を満たす。天下りだが、 sn は以下の加法定理を満たす。

$$\operatorname{sn}(x+y) = \frac{\operatorname{sn} x \operatorname{cn} y \operatorname{dn} y + \operatorname{sn} y \operatorname{cn} x \operatorname{dn} x}{1 - k^2 \operatorname{sn}^2 x \operatorname{sn}^2 y} \quad (21.25)$$

この加法定理 (21.25) を証明しよう。それには、 $x+y=c$ と置いた式

$$\operatorname{sn} c = \frac{\operatorname{sn} x \operatorname{cn}(c-x) \operatorname{dn}(c-x) + \operatorname{sn}(c-x) \operatorname{cn} x \operatorname{dn} x}{1 - k^2 \operatorname{sn}^2 x \operatorname{sn}^2(c-x)} = \frac{\operatorname{sn} x (\operatorname{sn}(c-x))' + \operatorname{sn}(c-x) (\operatorname{sn} x)'}{1 - k^2 \operatorname{sn}^2 x \operatorname{sn}^2(c-x)} \quad (21.26)$$

の右辺の x 微分がゼロであることを確認すれば十分である ($x=0$ のときに右辺 = $\operatorname{sn} c =$ 左辺であることは簡単に確認できるので)。式 (21.26) 右辺の分子を N 、分母を D と置く。 N/D の微分は $(N'D - D'N)/D^2$ なので、 $N'D = D'N$ が示せれば十分である。 sn の 2 階微分が

$$(\operatorname{sn} x)'' = (\operatorname{cn} x)' \operatorname{dn} x + \operatorname{cn} x (\operatorname{dn} x)' = \operatorname{sn} x (-\operatorname{dn}^2 x - k^2 \operatorname{cn}^2 x) = -(1+k^2) \operatorname{sn} x + 2k^2 \operatorname{sn}^3 x \quad (21.27)$$

を満たすことを用いれば、 N と D の微分はそれぞれ

$$N' = 2k^2 \operatorname{sn} x \operatorname{sn}(c-x) (\operatorname{sn}^2 x - \operatorname{sn}^2(c-x)) \quad (21.28)$$

$$D' = 2k^2 \operatorname{sn} x \operatorname{sn}(c-x) [\operatorname{sn} x \operatorname{cn}(c-x) \operatorname{dn}(c-x) - \operatorname{sn}(c-x) \operatorname{cn} x \operatorname{dn} x] \quad (21.29)$$

だと分かる。これを代入して頑張って計算すると

$$N'D = D'N \quad (21.30)$$

が示せる。

ちなみに、 cn と dn もそれぞれ以下の加法定理を満たす。

$$\operatorname{cn}(x+y) = \frac{\operatorname{cn} x \operatorname{cn} y - \operatorname{sn} x \operatorname{sn} y \operatorname{dn} x \operatorname{dn} y}{1 - k^2 \operatorname{sn}^2 x \operatorname{sn}^2 y} \quad (21.31)$$

$$\operatorname{dn}(x+y) = \frac{\operatorname{dn} x \operatorname{dn} y - k^2 \operatorname{sn} x \operatorname{sn} y \operatorname{cn} x \operatorname{cn} y}{1 - k^2 \operatorname{sn}^2 x \operatorname{sn}^2 y} \quad (21.32)$$

元々の (積分を用いて定義された) ヤコビの楕円関数 $\operatorname{sn} x$ は、 $K = F(\frac{\pi}{2}, k)$ を用いて $-K \leq x \leq K$ の

範囲でしか定義できていなかった。しかし、三角関数の場合と同様に、加法定理を用いて値を定義していくことで、定義域を実数全体に拡張できる。そうすると、例えば sn は $x = K$ で対称な形

$$\operatorname{sn} x = \operatorname{sn}(2K - x) \quad (21.33)$$

をしており、周期が $4K$ である

$$\operatorname{sn}(4K + x) = \operatorname{sn} x \quad (21.34)$$

ことなどが分かる³⁵⁰。

[21-2]. 式 (21.33) を導出せよ。

完全楕円積分の超幾何関数表示

完全楕円積分は超幾何関数を用いて表すことができる。第一種完全楕円積分は、

$$\begin{aligned} F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) &= \int_0^1 \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}} = \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1-k^2\sin^2\theta}} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{(-1)^n (2n-1)!!}{2^n} (-k^2)^n \int_0^{\pi/2} d\theta \sin^{2n}\theta \end{aligned} \quad (21.35)$$

となる。ただし最後の等式では $1/\sqrt{1-x}$ をテイラー展開した。 $\int_0^{\pi/2} d\theta \sin^{2n}\theta = \frac{\pi}{2} \frac{(2n-1)!!}{2n!!}$ なので、これを代入して整理することで第一種完全楕円積分は

$$F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) = \frac{\pi}{2} F\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; k^2\right) \quad (21.36)$$

と超幾何関数を用いて表せる。

同様に、第二種完全楕円積分は

$$E\left(\frac{\pi}{2}, k\right) = \frac{\pi}{2} F\left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; k^2\right) \quad (21.37)$$

と表せる。

21.3 応用：力学のいくつかの問題

この節では、ヤコビの楕円関数の力学への応用をいくつか見ることにしよう。実は、高校の物理と大学1年の力学でそれぞれ、ヤコビの楕円関数が必要となる問題を既に見ているはずである。まずはそれらを確認していくことにしよう。

振り子の運動

長さ l 、先端の質点の質量 m の振り子の運動を考えよう。鉛直方向に対して振り子のなす角度 θ を変数にとり、これが満たす微分方程式を考えたい。質点の運動方程式を直接考えてもよいが、エネルギー保存則が

$$\frac{1}{2}ml^2 \left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2 + mgl(1 - \cos\theta) = E \quad (21.38)$$

と書けるので、これを出発点にする。振り子が到達する最大角を θ_0 とすると、 $E = mgl(1 - \cos\theta_0)$ である。これを用いて整理すると、 θ は微分方程式

$$\frac{d\theta}{dt} = \sqrt{\frac{2g}{l}(\cos\theta - \cos\theta_0)} = 2\sqrt{\frac{g}{l} \left(\sin^2\frac{\theta_0}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}\right)} \quad (21.39)$$

³⁵⁰ cn は周期 $4K$ 、 dn は周期 $2K$ である。後の節で複素方向への拡張を見るが、 cn と dn の周期は sn の場合とは微妙に異なる。

を満たすと分かる。変数を $x = \sin \frac{\theta}{2} / \sin \frac{\theta_0}{2}$ 、 $k = \sin \frac{\theta_0}{2}$ と置くと、 $\frac{dx}{d\theta} = \sqrt{1 - k^2 x^2} / 2k$ が得られるので、

$$\frac{dx}{dt} = \sqrt{\frac{g}{l}(1-x^2)(1-k^2x^2)} \quad (21.40)$$

が得られる。この微分方程式は変数分離法で解けて

$$\int \frac{dx}{\sqrt{(1-x^2)(1-k^2x^2)}} = \sqrt{\frac{g}{l}} \int dt \quad (21.41)$$

となる。左辺は楕円積分そのものなので、結局

$$x = \operatorname{sn} \left(\sqrt{\frac{g}{l}}(t - t_0), k \right) \quad (21.42)$$

が解となる。変数を元に戻すと

$$\theta(t) = 2 \arcsin \left[\sin \frac{\theta_0}{2} \operatorname{sn} \left(\sqrt{\frac{g}{l}}(t - t_0), \sin \frac{\theta_0}{2} \right) \right] \quad (21.43)$$

が解として得られる。

振り子の運動がヤコビの楕円関数（あるいは楕円積分）を用いて解けたわけだが、「振り子の問題で現れる積分を楕円積分と名付けた」と見てもよいわけで、そうみるならばこれは単に名前を付けただけであり、そこまで「応用して解けた」というほどでもないかもしれない。ただし、これと同じ積分がそれ以外のさまざまな問題にも表れるということは、注目に値する。

オイラーのコマ

一点が固定された三次元空間中の剛体の運動を考察しよう³⁵¹。角運動量の変化についての式

$$\frac{d}{dt} \mathbf{L} = \mathbf{N} \quad (21.44)$$

を出発点にする。ただし $\mathbf{L} = I\boldsymbol{\omega}$ は角運動量ベクトル（ I は慣性モーメントテンソル、 $\boldsymbol{\omega}$ は角速度ベクトル）、 \mathbf{N} はこの剛体にかかっている固定点回りのトルクである。ここから、角速度ベクトル $\boldsymbol{\omega}$ の時間発展を導く。

式 (21.44) は外部にある慣性系から見た角運動量だが、剛体の議論では「剛体に固定された座標」で見たいことが多い。実際、もし外部の慣性系から見て議論をすることになると、剛体は時々刻々向きを変えるので、慣性テンソルが時間とともに変化するという、扱いにくい状況になる。剛体に沿った座標系³⁵² で運動を見ると、運動方程式は

$$\dot{\mathbf{L}} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{L} = \mathbf{N} \quad (21.45)$$

と書ける。なお、以降しばらく剛体に沿った座標系を用いるので、剛体に沿った座標系の量に対しても静止系の場合と同じ記号を用いる。 $\mathbf{L} = I\boldsymbol{\omega}$ なので、角速度ベクトルの時間発展方程式として

$$I\dot{\boldsymbol{\omega}} + \boldsymbol{\omega} \times I\boldsymbol{\omega} = \mathbf{N} \quad (21.46)$$

が得られる。特に慣性主軸を座標軸にとれば、 $L_i = I_i\omega_i$ が成り立ち、式 (21.46) は

$$I_1\dot{\omega}_1 - \omega_2\omega_3(I_2 - I_3) = N_1 \quad (21.47)$$

$$I_2\dot{\omega}_2 - \omega_3\omega_1(I_3 - I_1) = N_2 \quad (21.48)$$

$$I_3\dot{\omega}_3 - \omega_1\omega_2(I_1 - I_2) = N_3 \quad (21.49)$$

である。これは1年生の力学の講義で習った「オイラーの運動方程式」である。

³⁵¹オイラーのコマとラグランジュのコマについては、ランダウ、リフシッツ『力学 増訂第3版』の記述を参照した。

³⁵²外部に固定された座標系から見ると、角運動量保存則より \mathbf{L} は時間変化しない。一方、剛体に沿った座標系から見ると、剛体が回転することにより \mathbf{L} の向きが変化する。

特にトルクがない状況、 $\mathbf{N} = \mathbf{0}$ 、を考えよう。この設定は「オイラーのコマ (Euler's top)」とも呼ばれる。重心が固定されている場合や、剛体を放り投げて重心座標で見ている場合などがこれに相当する。以下 $I_1 > I_2 > I_3$ とする³⁵³。また、 $L^2 > 2EI_2$ が成り立つとする (この不等式が逆の場合は、以下の I_1 と I_3 を逆にする)。

エネルギー保存則は

$$\frac{1}{2} \left(\frac{L_1^2}{I_1} + \frac{L_2^2}{I_2} + \frac{L_3^2}{I_3} \right) = \frac{1}{2} (I_1 \omega_1^2 + I_2 \omega_2^2 + I_3 \omega_3^2) = E \quad (21.50)$$

と書ける。また角運動量の大きさ自身も保存するので、

$$L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 = I_1^2 \omega_1^2 + I_2^2 \omega_2^2 + I_3^2 \omega_3^2 = L^2 \quad (21.51)$$

も成り立つ³⁵⁴。ただし L は角運動量ベクトルの長さである。この二つの保存則を用いると、式 (21.48) は

$$\frac{d\omega_2}{dt} = \frac{I_3 - I_1}{I_2} \omega_1 \omega_3 = \frac{1}{I_2 \sqrt{I_1 I_3}} \sqrt{[(2EI_3 - L^2) - I_2(I_3 - I_2)\omega_2^2] [L^2 - 2EI_1 - I_2(I_2 - I_1)\omega_2^2]} \quad (21.52)$$

と計算できる。文字が多くて分かりにくいだが、 ω_2 に関わる部分だけ見ると、右辺は $\sqrt{(a - b\omega_2^2)(c - d\omega_2^2)}$ という形をしているので、これは楕円積分に持ち込める。実際、以下のように

$$\tau := t \sqrt{\frac{(I_3 - I_2)(L^2 - 2EI_1)}{I_1 I_2 I_3}}, \quad s := \omega_2 \sqrt{\frac{I_2(I_3 - I_2)}{2EI_3 - L^2}}, \quad k^2 := \frac{(I_2 - I_1)(2EI_3 - L^2)}{(I_3 - I_2)(L^2 - 2EI_1)} \quad (21.53)$$

と時刻を t から τ に、角速度を ω_2 から s に変換し、パラメータ $k^2 < 1$ を導入すると、 s (つまり ω_2) の微分方程式は

$$\frac{ds}{d\tau} = \sqrt{(1 - s^2)(1 - k^2 s^2)} \quad (21.54)$$

となり、

$$\tau = \int_0^s \frac{da}{\sqrt{(1 - a^2)(1 - k^2 a^2)}} \quad (21.55)$$

と楕円積分の形で解が求まる。今の変数の下だと $s = \text{sn}(\tau, k)$ と解ける。元の変数に戻すと

$$\omega_2(t) = \sqrt{\frac{2EI_3 - L^2}{I_2(I_3 - I_2)}} \text{sn} \left(\sqrt{\frac{(I_3 - I_2)(L^2 - 2EI_1)}{I_1 I_2 I_3}} t, \sqrt{\frac{(I_2 - I_1)(2EI_3 - L^2)}{(I_3 - I_2)(L^2 - 2EI_1)}} \right) \quad (21.56)$$

が解である。

<補論>：ラグランジュのコマ

次に、重心ではない一点が固定された対称なコマの一様重力下の運動を解析しよう。特に、 $I_1 = I_2 \neq I_3$ であり、 I_3 の慣性主軸上の一点が固定されているものとする。これは「ラグランジュのコマ (Lagrange's top)」とも呼ばれる。典型例は一点で地面に接する軸対称なコマである。今回の設定の場合、座標系は剛体に固定されたものではなく、コマの外部に固定されたものを用いた方がよい。特に、固定点を原点とした対称軸の向きの極座標 (θ, ϕ) と、対称軸周りの回転角 ψ の3変数で状態を指定する³⁵⁵ ことにする (図 51)。 ϕ 方向の軸の回転をコマの「歳差運動³⁵⁶ (precession)」、 θ 方向の軸の振動をコマの「章動 (nutation)」という³⁵⁷。

ϕ 方向回転が I_1 軸と I_3 軸が混ざり合う向きであることに気を付けると、この系の運動エネルギーは

$$K = \frac{1}{2} I_1 \dot{\theta}^2 + \frac{1}{2} I_1 (\dot{\phi} \sin \theta)^2 + \frac{1}{2} I_3 (\dot{\psi} + \dot{\phi} \cos \theta)^2 \quad (21.57)$$

³⁵³ I_i のどれか2つが等しければ、これは調和振動になり、容易に解くことが出来る。

³⁵⁴ 今は剛体に沿った座標系を用いているので、各向きの角運動量は変化する。

³⁵⁵ このような角度の指定方法を「オイラー角 (Euler angle)」という。

³⁵⁶ 「首振り運動」「みそすり運動」「すりこぎ運動」などとも呼ばれる。

³⁵⁷ 歳差運動は普段のコマ遊びで簡単に観察できるが、章動はなかなか見えにくい。「コマの歳差運動のシミュレーション」<https://www.youtube.com/watch?v=z kwa 0 ebx j j U> では、章動を含めたコマのシミュレーション動画が見れる。

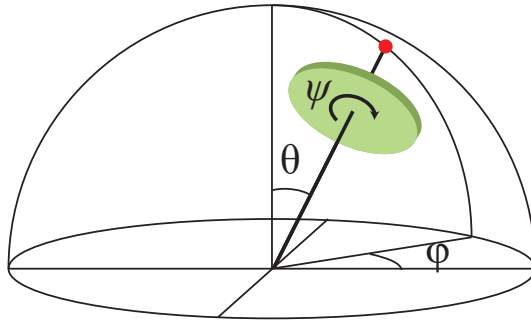


図 51: 一点が固定されたコマの運動の解析における座標の設定。回転軸に対する極座標 (θ, ϕ) と、回転軸周りの剛体の回転角 ψ の 3 変数で状態が指定できる。

と書けることが分かる³⁵⁸。コマの質量を M 、固定点から重心までの距離を l とすると、ラグランジアンは

$$L = \frac{1}{2}I_1(\dot{\theta}^2 + \dot{\phi}^2 \sin^2 \theta) + \frac{1}{2}I_3(\dot{\psi} + \dot{\phi} \cos \theta)^2 - Mgl \cos \theta \quad (21.58)$$

と書ける。見ると明らかなように、ラグランジアンは ψ および ϕ を陽に含んでいない。そのため、オイラー・ラグランジュ方程式より、

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = I_3(\dot{\psi} + \dot{\phi} \cos \theta) = 0 \quad (21.59)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = I_1 \dot{\phi} \sin^2 \theta + I_3 \dot{\phi} \cos^2 \theta + I_3 \dot{\psi} \cos \theta = 0 \quad (21.60)$$

となり、この 2 つの量が時間変化しない保存量であることが直ちにわかる。保存量として、上記の二つを I_1 で割った値

$$A := \frac{I_3}{I_1}(\dot{\psi} + \dot{\phi} \cos \theta) \quad (21.61)$$

$$B := \dot{\phi} \sin^2 \theta + \frac{I_3}{I_1}(\dot{\phi} \cos^2 \theta + \dot{\psi} \cos \theta) \quad (21.62)$$

を導入しておこう。これらの値は初期状態にのみ依存して決まる量である。

A, B が決まれば、 $\dot{\psi}$ と $\dot{\phi}$ を消去して、 θ のみの運動方程式に変形することができる。式 (21.61) より $\dot{\psi} = \frac{AI_1}{I_3} - \dot{\phi} \cos \theta$ であり、これを式 (21.62) に代入して整理すると

$$\dot{\phi} = \frac{B - A \cos \theta}{\sin^2 \theta} \quad (21.63)$$

が得られる。全エネルギー $E = K + U$ もまた保存量なので、

$$E - \frac{I_1^2 A^2}{2I_3} = \frac{1}{2}I_1 \dot{\theta}^2 + \frac{I_1(B - A \cos \theta)^2}{2 \sin^2 \theta} + Mgl \cos \theta \quad (21.64)$$

は保存する³⁵⁹。

見通しをよくするために、さらに $u = \cos \theta$ という変数変換をする。この変数変換の下で式 (21.64) を整理すると

$$\dot{u}^2 = (1 - u^2)(C - Du) - (B - Au)^2 \quad (21.65)$$

³⁵⁸ $I_1 = I_2$ なので、 x 軸から ϕ だけ回転したところを 1 軸にとることができる。そうすると θ の変化は純粋な 2 軸周りの回転とみなせる。一方、 θ による傾きがあるため、 ϕ の変化は 1 軸周りと 3 軸周りの回転が混ざり合ったものになる。

³⁵⁹ 後の計算の都合で、 $\frac{I_1^2 A^2}{2I_3}$ を左辺に移した。

となる。ただしここで

$$C := \frac{2E}{I_1} - \frac{I_1 A^2}{I_3} \quad (21.66)$$

$$D := \frac{2Mgl}{I_1} \quad (21.67)$$

と置いた。右辺の因数分解を $D(u-a)(u-b)(u-c)$ と置く（三次方程式は解の公式があるので、 $A \sim D$ を用いて a, b, c を書き下すこともできる）。このとき、変数変換

$$s = \sqrt{\frac{u-a}{b-a}} \quad (21.68)$$

を行うと、 $k := \sqrt{(b-a)/(c-a)}$ を用いて

$$t = \int \frac{du}{\sqrt{D(u-a)(u-b)(u-c)}} = \frac{2}{\sqrt{D(c-a)}} \int \frac{ds}{\sqrt{(1-s^2)(1-k^2s^2)}} \quad (21.69)$$

となり、解はヤコビの楕円関数で記述できることが分かる。

他にも、大縄跳びの大縄の形状や座屈現象が、ヤコビの楕円関数を用いて解けることが知られている³⁶⁰。

21.4 応用：相加相乗平均との関係

楕円積分の応用例として、相加相乗平均との意外なつながりについて見てみたい。二つの初期値 $a_0 \geq b_0$ に対し、二つの数列 $\{a_n\}, \{b_n\}$ を

$$a_{n+1} = \frac{a_n + b_n}{2}, \quad b_{n+1} = \sqrt{a_n b_n} \quad (21.70)$$

で帰納的に定義する。つまり、 a_{n+1} と b_{n+1} は、それぞれ a_n と b_n の相加平均と相乗平均だということである。

相加相乗不等式より、

$$a_n \geq a_{n+1} \geq b_{n+1} \geq b_n \quad (21.71)$$

が成り立つ。さらに

$$0 < a_{n+1} - b_{n+1} \leq a_{n+1} - b_n = \frac{1}{2}(a_n - b_n) \quad (21.72)$$

が成り立つので、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (a_n - b_n) = 0 \quad (21.73)$$

である³⁶¹。よって a_n と b_n は共通の値に収束する。これを

$$M(a_0, b_0) := \lim_{n \rightarrow \infty} a_n = \lim_{n \rightarrow \infty} b_n \quad (21.74)$$

と書くことにする。

この量は一見楕円積分とは何も関係がないように見えるが、実は $M(a, b)$ は楕円積分そのものであることが示せる³⁶²。

定理 21.1. $a \geq b > 0$ に対し、以下が成り立つ。

$$I(a, b) := \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{a^2 \cos^2 \theta + b^2 \sin^2 \theta}} = \frac{\pi}{2M(a, b)} \quad (21.75)$$

³⁶⁰ 戸田盛和『楕円関数入門』日本評論社に導出が出ている。

³⁶¹ $(a_n - b_n) \leq (a_0 - b_0)/2^n$ である。

³⁶² 以下の証明は梅村浩『楕円関数論 楕円曲線の解析学』東京大学出版会の 6.1 節を参照した。

左辺 $I(a, b)$ は

$$\int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{a^2 \cos^2 \theta + b^2 \sin^2 \theta}} = \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{a^2(1 - (1 - b^2/a^2) \sin^2 \theta)}} = \frac{1}{a} F\left(\frac{\pi}{2}, \sqrt{1 - \frac{b^2}{a^2}}\right) \quad (21.76)$$

なので、これは第一種楕円積分そのものである³⁶³。

証明. $I(a, b)$ の積分において、 $t = b \tan \theta$ と変数変換すると

$$I(a, b) = \frac{1}{2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{a^2 \cos^2 \theta + b^2 \sin^2 \theta}} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{\sqrt{(a^2 + t^2)(b^2 + t^2)}} \quad (21.77)$$

となるので、以下ではこの右辺を考察する。

我々の目標は、

$$I(a, b) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{\sqrt{(a^2 + t^2)(b^2 + t^2)}} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{\sqrt{\left(\left(\frac{a+b}{2}\right)^2 + t^2\right) \left(\sqrt{ab}^2 + t^2\right)}} = I\left(\frac{a+b}{2}, \sqrt{ab}\right) \quad (21.78)$$

を示すことである。式 (21.78) が示せれば、 $I(a_0, b_0) = I(a_1, b_1) = \dots = I(a_\infty, b_\infty) = I(M, M) = \pi/2M$ と導きたい結果が直ちに示せる。

式 (21.78) を示すため、変数変換

$$u = \frac{1}{2} \left(t - \frac{ab}{t} \right) \quad (21.79)$$

を行う。

$$\frac{du}{dt} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{ab}{t^2} \right) = \sqrt{\frac{u^2 + ab}{t^2}} \quad (21.80)$$

と書けるので、 $0 < t < \infty$ が $-\infty < u < \infty$ に対応することに注意すると、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{\sqrt{(a^2 + t^2)(b^2 + t^2)}} &= 2 \int_0^{\infty} \frac{dt}{\sqrt{(a^2 + t^2)(b^2 + t^2)}} = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{\sqrt{\frac{(a^2+t^2)(b^2+t^2)}{t^2} (u^2 + ab)}} \\ &= 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{\sqrt{(4u^2 + (a+b)^2)(u^2 + ab)}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{\sqrt{\left(u^2 + \left(\frac{a+b}{2}\right)^2\right) (u^2 + ab)}} \end{aligned} \quad (21.81)$$

となり、求めたかった式 (21.78) が得られた。□

この関係式を利用することによる、算術幾何平均を繰り返しとるだけで非常に高速で収束する円周率計算公式を得ることも出来る³⁶⁴。

³⁶³ ガウスは手計算で小数点第 11 桁まで計算して、式 (21.75) が成り立つことを発見した。

³⁶⁴ 梅村浩『楕円関数論 楕円曲線の解析学』東京大学出版会の 6.2 節に公式とその導出が出ている。結果のみ示すと、 $c_n := \sqrt{a_n^2 - b_n^2} = (a_{n-1} - b_{n-1})/2$ に対し

$$\pi = \frac{2M(1/\sqrt{2})^2}{1 - \sum_{n=0}^{\infty} 2^n c_n^2} \quad (21.82)$$

が成り立つ。

21.5 ヤコビの楕円関数の複素関数化

ヤコビの楕円関数 sn は楕円積分の逆関数として定義したので、そのままでは実数に対してしか定義がなされていない状態である。これを以下のように複素数に拡張する³⁶⁵。

まず引数が純虚数の場合を考える。そのために、 sn の定義式の積分に $x = ia$ を代入した

$$\int_0^{ia} \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}} = i \int_0^a \frac{ds}{\sqrt{(1+s^2)(1+k^2s^2)}} \quad (21.83)$$

という積分を考える。ただし右辺への変形では $s = -it$ という変数変換を行った。右辺の形から明らかのように、左辺の積分の結果は純虚数である。そのため、この積分の値を v と置けば

$$iv = \int_0^{ia} \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}} \quad (21.84)$$

$$\rightarrow ia =: \operatorname{sn}(iv) \quad (21.85)$$

で、純虚数の場合のヤコビの楕円関数を定義することにする³⁶⁶。

ただしこのままでは式 (21.83) 右辺の積分がどのようなものなのかよくわからない。そこで、この積分を既知のヤコビの楕円関数を用いて表すことを考える。通常の場合と同様に、ルジャンドルの標準形に近い形に変形しよう。ただし今回は項が $(1-t^2)$ の形ではなく $(1+s^2)$ の形をしているので、 $s = \tan \theta$ と変数変換する。すると式 (21.83) 右辺は

$$v = \int_0^a \frac{ds}{\sqrt{(1+s^2)(1+k^2s^2)}} = \int_0^\psi \frac{d\theta}{\sqrt{1-k'^2 \sin^2 \theta}} \quad (21.86)$$

と書ける。ただし $a = \tan \psi$ 、 $k' := \sqrt{1-k^2}$ と置いた。右辺は楕円積分のルジャンドルの標準形そのものなので、ヤコビの楕円積分の定義を思い出すと、これは

$$\operatorname{sn}(v, k') = \sin \psi \quad (21.87)$$

が成り立つということである。

cn の定義より $\operatorname{cn}(v, k') = \cos \psi$ が成り立つので、

$$\operatorname{sn}(iv, k) = ia = i \tan \psi = i \frac{\operatorname{sn}(v, k')}{\operatorname{cn}(v, k')} \quad (21.88)$$

と、引数が純虚数の場合の sn が、パラメータ k' の sn と cn を用いて表せた。同様にして

$$\operatorname{cn}(iv, k) = \frac{1}{\operatorname{cn}(v, k')} \quad (21.89)$$

$$\operatorname{dn}(iv, k) = \frac{\operatorname{dn}(v, k')}{\operatorname{cn}(v, k')} \quad (21.90)$$

が得られる。

一般の複素数の場合、すなわち $\operatorname{sn}(a+bi)$ の値は、 sn の加法定理 (21.25) を用いて計算すればよい。

では、複素関数 sn の周期、極とゼロ点を求めよう。 sn が周期 $4K = 4F(\frac{\pi}{2}, k)$ を持つことは既に見た。しかし、 sn は虚軸方向にもう一つ別の周期を持つ。

sn の虚軸方向の定義は式 (21.88) である。楕円積分を用いて $K' := F(\frac{\pi}{2}, k')$ と置くと、 $\operatorname{sn}(v+2K', k') = -\operatorname{sn}(v, k')$ 、 $\operatorname{cn}(v+2K', k') = -\operatorname{cn}(v, k')$ が成り立つので、

$$\operatorname{sn}(iv+2iK', k) = \operatorname{sn}(iv, k) \quad (21.91)$$

³⁶⁵ 複素関数論の観点からトップダウンに議論を進める場合には、ヤコビのテータ関数を導入し、その比としてヤコビの楕円関数 sn を定義する。ここで述べるのはボトムアップのわりと泥臭いタイプの議論である。

³⁶⁶ 本当はこれが well-defined な定義であること (加法定理で整合的な結果を与えることなど) を確認する必要があるが、ここでは省略する。

が成り立つ。つまり、 sn は周期 $2iK'$ を持つ。このように2つの周期を持つ関数を「二重周期関数」という。二重周期関数については次の節で一般的な視点から詳しく考察する。

次に sn の極を求めよう。 $\operatorname{cn}(v, k')$ は $v = K'$ でゼロになるので、 $\operatorname{sn}(iK', k)$ は発散する。つまり $\operatorname{sn}(x, k)$ は $x = iK'$ を極に持つ。

そうすると、 $x = iK' + y$ ($y \in \mathbb{R}$) の直線上はすべて極に見えるかもしれないが、実はそうはなっていない。加法定理 (21.25) に代入してみると

$$\begin{aligned} \operatorname{sn}(iK' + y) &= \frac{\operatorname{sn}(iK') \operatorname{cn} y \operatorname{dn} y + \operatorname{sn} y \operatorname{cn}(iK') \operatorname{dn}(iK')}{1 - k^2 \operatorname{sn}^2(iK') \operatorname{sn}^2 y} \\ &= \frac{i \frac{\operatorname{sn}(K', k')}{\operatorname{cn}(K', k')} \operatorname{cn} y \operatorname{dn} y + \operatorname{sn} y \frac{1}{\operatorname{cn}(K', k')} \frac{\operatorname{dn}(K', k')}{\operatorname{cn}(K', k')}}{1 + k^2 \frac{\operatorname{sn}^2(K', k')}{\operatorname{cn}^2(K', k')} \operatorname{sn}^2 y} \\ &= \frac{i \operatorname{sn}(K', k') \operatorname{cn}(K', k') \operatorname{cn} y \operatorname{dn} y + \operatorname{sn} y \operatorname{dn}(K', k')}{\operatorname{cn}^2(K', k') + k^2 \operatorname{sn}^2(K', k') \operatorname{sn}^2 y} \end{aligned} \quad (21.92)$$

なので、 $\operatorname{sn} y \neq 0$ 、 $\operatorname{sn}^2(K', k') \neq 0$ ならば、 $\operatorname{cn}(K', k') \rightarrow 0$ としても右辺は発散しない。むしろ右辺は

$$= \frac{\operatorname{dn}(K', k')}{k^2 \operatorname{sn}^2(K', k') \operatorname{sn} y} \quad (21.93)$$

となり、 $x = iK' + y$ ($y \in \mathbb{R}$) の直線上では sn は実数となることが分かる。極は $y = 0$ と $y = 2K$ の2か所である。

ちなみにゼロ点は、 $x = 2nK$ ($n \in \mathbb{Z}$) である。もちろん極とゼロ点は、二重周期に従って複素数平面全域にくまなくひろがっている。

[21-3]. $\operatorname{sn} z$ が実数をとるような複素数 z を全て求めよ。

21.6 二重周期関数としての楕円関数

ここまで、楕円積分の逆関数という非常に具体的かつイメージしやすい形で、楕円関数の一つであるヤコビの楕円関数を導入し、それについて詳しく議論してきた。ここからは、複素関数論の立場から、抽象的に楕円関数の特徴づけていく。なお、収束性などの数学的に厳密な取り扱いとは適宜端折りながら議論を進めていく。

複素数を引数に持つ関数 $f(z)$ について、ある $\omega \in \mathbb{C}$ が存在し、 $f(z + \omega) = f(z)$ が任意の $z \in \mathbb{C}$ で成り立つとき、この関数は周期 ω を持つという。例えば三角関数 $\cos x$ 、あるいは複素平面へ拡張した $\cos z := (e^{iz} + e^{-iz})/2$ は、周期 2π を持つ関数である。

これを一般化させ、二種類の異なる周期 ω_1, ω_2 を持つ関数 $f(z)$ を考えよう。つまり、任意の z について

$$f(z + \omega_1) = f(z), \quad f(z + \omega_2) = f(z) \quad (21.94)$$

が成り立つということである。ただし、 $\omega_1 = k\omega_2$ となるような実数 k がある場合は単一周期的場合と変わらない³⁶⁷ ので、 $\omega_2/\omega_1 =: \tau \notin \mathbb{R}$ の場合を考える。このような関数を「二重周期関数 (doubly periodic function)」という。

複素平面は2次元なので、三重周期を持つことは出来ない。よって、周期関数を最も一般化したものは二重周期関数である。そして、複素関数論における「楕円関数」とは、二重周期関数のことをいう。

定義 21.1 (楕円関数). 複素有理関数 $f(z)$ が楕円関数であるとは、その有理関数が定数関数でない二重周期関数であることをいう。

³⁶⁷ より正確には、 k が有理数の場合は単一周期的、 k が無理数の場合は ω 方向に定数の関数である。

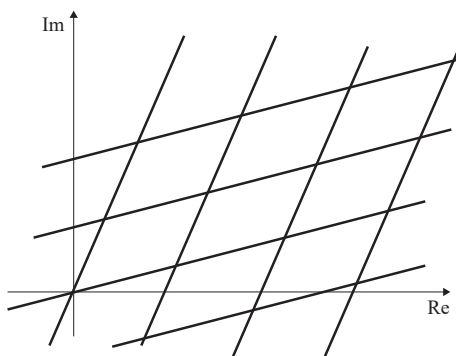


図 52: 二重周期のイメージ図。一つの平行四辺形が基本周期平行四辺形である。

これで楕円関数は定義できたが、しかしこれだけでは抽象的過ぎて、楕円関数（二重周期関数）がどのような関数なのか、その性質はよくわからない。そこで以下では、楕円関数はどのような性質を持つかを考察していく。なお、引数を ω_1 で割ることで、周期は 1 と $\tau \notin \mathbb{R}$ の楕円関数を考えれば十分なので、以下ではこの設定で考える。

以下の定理は、楕円関数の性質を議論する際に繰り返し用いられる基本的なものである。

定理 21.2 (リウヴィルの第一定理 (Liouville's first theorem)). 二重周期を持つ整関数³⁶⁸は定数関数である。

証明. 二重周期を持つ整関数は有界である。複素関数論のリウヴィルの定理により、有界な整関数は定数関数のみである³⁶⁹。 □

$0, 1, 1 + \tau, \tau$ の 4 点に囲まれた平行四辺形を「基本周期平行四辺形」という。リウヴィルの第一定理により、楕円関数は基本周期平行四辺形内に特異点を持つ必要がある。次の定理は、どのような特異点があるかに制限を課す。

定理 21.3 (リウヴィルの第二定理 (Liouville's second theorem)). 基本周期平行四辺形内に 1 位の極を一つだけ持つ二重周期関数は存在しない。

証明. 原点を適宜動かすことにより、極は基本周期平行四辺形の边上ではなく内部だとして一般性を失わない。 C を基本周期平行四辺形の边上を周る経路とすると、コーシーの積分定理により

$$\text{Res} f(z) = \oint_C dz f(z) \quad (21.96)$$

が成り立つ。ところが二重周期性より

$$\int_0^1 dz f(z) = \int_\tau^{1+\tau} dz f(z), \quad \int_0^\tau dz f(z) = \int_1^{1+\tau} dz f(z) \quad (21.97)$$

³⁶⁸ 複素数平面全域で定義された正則関数（全域で微分可能な関数）のこと。

³⁶⁹ 複素関数論でリウヴィルの定理を習ったと思うが、念のため証明を書いておく。 $|f(z)| < M$ とすると、グルサの定理により

$$|f'(z)| = \left| \frac{1}{2\pi i} \int_{|z|=r} \frac{f(z)}{z^2} dz \right| \leq \frac{1}{2\pi} \frac{M}{r^2} 2\pi r = \frac{M}{r} \quad (21.95)$$

が成り立つ。 r は任意なので、 $r \rightarrow \infty$ とすることで $|f'(z)| = 0$ を得る。

が成り立つので、式 (21.96) 右辺は

$$\oint_C dzf(z) = \int_0^1 dzf(z) + \int_1^{1+\tau} dzf(z) + \int_{1+\tau}^{\tau} dzf(z) + \int_{\tau}^0 dzf(z) = 0 \quad (21.98)$$

である。よって $\text{Res}f(z) = 0$ であり、これは 1 位の極が一つの場合には実現しえない。□

定理 21.4 (リウヴィルの第三定理 (Liouville's third theorem)). 二重周期関数は、基本周期平行四辺形内において、等しい数の極とゼロ点を持つ。ただし n 位の極及びゼロ点はそれぞれ n 個と数える。

証明. 二重周期関数 $f(z)$ に対し、 $F(z) = f'(z)/f(z) = (\ln f(z))'$ という関数を考える。 $f(z)$ が z_i において p_i 位の極を持つ場合、すなわち $f(z) \sim (z - z_i)^{-p_i}$ が成り立つ場合、 $F(z)$ は z_i 近傍で

$$F(z) = \frac{d}{dz} \ln f(z) \sim -\frac{p_i}{z - z_i} \quad (21.99)$$

となり、 z_i は $F(z)$ の 1 位の極であり、係数 $-p_i$ がかかる。これはゼロ点の位数についても同様で、 $f(z) \sim (z - z_j)^{q_j}$ が成り立つ場合、 $F(z)$ は z_j 近傍で

$$F(z) = \frac{d}{dz} \ln f(z) \sim \frac{q_j}{z - z_j} \quad (21.100)$$

となり、 z_i は $F(z)$ の 1 位の極であり、係数 q_i がかかる。

$F(z)$ に対し、基本周期平行四辺形の辺に沿った積分を考える。留数積分をすることにより

$$0 = \oint_C dzF(z) = \sum_i (-p_i) + \sum_j q_j \quad (21.101)$$

が得られる。よって $f(z)$ の極とゼロ点の数は等しい。□

リウヴィルの定理は第四までであるが、ここでは省略する。

リウヴィルの第一定理の強力な応用として、以下の結果がある

定理 21.5. $f(z)$ と $g(z)$ は共通の周期を持ち、極とゼロ点が位数を含めて一致しているとする。このとき、 $g(z)$ は $f(z)$ の定数倍である。

証明. 関数 $F(z) = f(z)/g(z)$ を考える。 $F(z)$ の極となりうる点は、 $f(z)$ の極及び $g(z)$ のゼロ点だが、これらは互いに分子分母キャンセルするので、実際にはどの点も極にならない³⁷⁰。よって $F(z)$ は極を持たない二重周期関数であり、リウヴィルの第一定理により定数関数である。これは $g(z) = cf(z)$ を意味する。□

21.7 ワイエルシュトラスの \wp 関数

リウヴィルの第二定理を踏まえると、もっとも単純な形の極を持つ楕円関数は、基本周期平行四辺形中に

- 2 位の極を一つだけ持つ
- 1 位の極を二つ持つ

³⁷⁰ちなみに、 $f(z)$ の極を $g(z)$ の極がすべてキャンセルして、なお $g(z)$ の極が余っている (極の総位数が $g(z)$ の方が大きい) 場合には、リウヴィルの第三定理により $g(z)$ のゼロ点の総位数もまた $f(z)$ のそれを上回るので、必ず $g(z)$ のゼロ点のどれかがキャンセルできず、 $F(z)$ に極が生まれる。そのため、この証明の論法は、 $f(z)$ と $g(z)$ の極とゼロ点がきっちり一致している場合にしか成り立たない。

のどちらかである。前者の雛型であるとともに、すべての楕円関数をそこから構成できる楕円関数が、ワイエルシュトラスの \wp 関数³⁷¹ である。(ちなみにヤコビの楕円関数 sn は後者の例になっている)

ワイエルシュトラスの \wp 関数は、基本周期平行四辺形の各頂点に 2 位の極を持つ関数である。これを記述するため、頂点集合及び原点を除く頂点の集合を

$$\Lambda := \{z = m + n\tau; m, n \in \mathbb{Z}\} \quad (21.102)$$

$$\Lambda^* := \Lambda - (0, 0) \quad (21.103)$$

と書くことにする。

定義 21.2 (ワイエルシュトラスの \wp 関数 (Weierstrass \wp function)). ワイエルシュトラスの \wp 関数は

$$\wp(z) := \frac{1}{z^2} + \sum_{w \in \Lambda^*} \left[\frac{1}{(z-w)^2} - \frac{1}{w^2} \right] \quad (21.104)$$

で定義される。

カッコ内の第二項 $\frac{1}{w^2}$ は、全体の発散を抑えるための項である。構成から、これが各頂点に 2 位の極を持つ二重周期関数であることはほぼ明らかである³⁷²。

ワイエルシュトラスの \wp 関数の性質をいくつか見ておこう。関数の形より明らかに、 $\wp(z)$ は偶関数である。偶関数であることと二重周期性とを組み合わせることで

$$\wp'(1/2) = \wp'(\tau/2) = \wp'\left(\frac{1+\tau}{2}\right) = 0 \quad (21.105)$$

が得られる。一方、 $\wp(z)$ の微分は

$$\wp'(z) = -2 \sum_{w \in \Lambda} \frac{1}{(z-w)^3} \quad (21.106)$$

なので、これは各頂点に 3 位の極を持つ二重周期関数である。リウヴィルの第三定理により、 $\wp'(z)$ のゼロ点は 3 個、つまり上記の 3 つ以外にはゼロ点は存在しないことが分かる。またこれら 3 つのゼロ点は 1 位であることもわかる。

そのため、 $(\wp'(z))^2$ は、 $z = 0$ に 6 位の極を持ち、 $z = 1/2, \tau/2, (1+\tau)/2$ に 2 位のゼロ点を持つ関数である。一方、

$$\wp(1/2) = e_1, \quad \wp(\tau/2) = e_2, \quad \wp\left(\frac{1+\tau}{2}\right) = e_3 \quad (21.107)$$

と置くと、

$$g(z) := (\wp - e_1)(\wp - e_2)(\wp - e_3) \quad (21.108)$$

もまた、 $z = 0$ に 6 位の極を持ち、 $z = 1/2, \tau/2, (1+\tau)/2$ に 2 位のゼロ点を持つ関数である³⁷³。よって定理 21.5 により、

$$(\wp')^2 = c(\wp - e_1)(\wp - e_2)(\wp - e_3) \quad (21.109)$$

と書けることが分かる。 $z = 0$ で展開して係数比較することにより、係数 c は 4 だと分かる³⁷⁴。以上より、ワイエルシュトラスの \wp 関数は、以下の非線形微分方程式

$$(f'(z))^2 = 4(f(z) - e_1)(f(z) - e_2)(f(z) - e_3) \quad (21.110)$$

の解であると分かる。

³⁷¹ \wp は「ペー」と読む。

³⁷² もちろん数学的には、関数の収束とともに、こうした基本性質もきちんと証明する必要がある。

³⁷³ ゼロ点が 1 位ではないのは、 \wp' が e_1, e_2, e_3 においてゼロとなるからである。また、 $\wp - e_i$ は 2 位の極をただ一つ持つので、リウヴィルの第三定理により、これらが 4 位以上のゼロ点となることはできない。

³⁷⁴ $\wp(z) \sim 1/z^2 \dots$ である一方、 $\wp'(z) \sim -2/z^3 \dots$ である。

しかし、このままでは e_1, e_2, e_3 の具体的な値が分からず、そのためこの微分方程式がどのような形かもわからない。もう少しわかりやすい表現を得るために、別の観点から考察を進めよう。 $\wp(z)$ をローラン展開すると

$$\wp(z) = \frac{1}{z^2} + 3E_4z^2 + 5E_6z^4 + 7E_8z^6 + \dots \quad (21.111)$$

が得られる。ただし E_k ($k \geq 4$) はアイゼンシュタイン級数 (Eisenstein series)

$$E_k := \sum_{\omega \in \Lambda^*} \frac{1}{\omega^k} \quad (21.112)$$

である。この級数展開より

$$(\wp(z))^2 = \frac{1}{z^4} + 6E_4 + \dots \quad (21.113)$$

$$(\wp(z))^3 = \frac{1}{z^6} + \frac{9E_4}{z^2} + 15E_6 + \dots \quad (21.114)$$

$$(\wp'(z))^2 = \frac{4}{z^6} - \frac{24E_4}{z^2} - 80E_6 + \dots \quad (21.115)$$

などが成り立つことが分かる。ただし \dots は z の 2 次以上の項が省略されている。

これらを組み合わせて、 z の負べきの項を消すと

$$(\wp'(z))^2 - 4(\wp(z))^3 + 60E_4\wp(z) = -140E_6 + \dots \quad (21.116)$$

という関係式が得られる。ところが、右辺は整関数かつ二重周期関数なので、リウヴィルの第一定理によりこれは定数でないといけない。すなわち、 \dots で省略された z の 2 次以上の項はゼロにならないといけない。よって、 $\wp(z)$ は以下の微分方程式を満たすことが分かる。

定理 21.6 (\wp 関数が満たす非線形微分方程式). \wp 関数は、以下の非線形微分方程式の解である。

$$(f'(z))^2 = 4(f(z))^3 - 60E_4f(z) - 140E_6 = 0 \quad (21.117)$$

またこれにより、 \wp 関数は実軸上では以下の積分

$$v := \int_x^\infty \frac{dt}{\sqrt{4t^3 - 60E_4t - 140E_6}} = \int_x^\infty \frac{dt}{\sqrt{4(t-e_1)(t-e_2)(t-e_3)}} \quad (21.118)$$

の逆関数

$$x = \wp(v) \quad (21.119)$$

であるということも分かる。この形を見れば、 \wp 関数がヤコビの楕円関数と近いこともよく分かるだろう。特にここで、

$$t := e_3 + \frac{e_1 - e_3}{s^2} \quad (21.120)$$

$$k := \sqrt{\frac{e_2 - e_3}{e_1 - e_3}} \quad (21.121)$$

と置き換えると、

$$v = \frac{1}{\sqrt{e_1 - e_3}} \int_0^y \frac{ds}{\sqrt{(1-s^2)(1-k^2s^2)}} \quad (21.122)$$

と第一種楕円積分の形で書ける。ただし y は $x - e_3 = (e_1 - e_3)/y^2$ を満たすように定められている。ヤコビの楕円関数 sn の定義より、 $y = \text{sn}((e_1 - e_3)v)$ が成り立つ。

以上をつなぎ合わせることににより、ワイエルシュトラスの \wp 関数とヤコビの楕円関数 sn を結びつける関

係式

$$\wp(v) = e_3 + \frac{e_1 - e_3}{\operatorname{sn}^2(\sqrt{e_1 - e_3}v)} \quad (21.123)$$

が得られる。

ここまで、 \wp 関数という特定の楕円関数を詳しく調べたが、我々が \wp 関数に着目するには理由がある。実は、 \wp 関数を用いれば、同じ二重周期を持つ任意の二重周期関数を表すことができるのである。

我々はまず、同じ周期 1 と τ を持つ偶関数 $f(z)$ が、 $\wp(z)$ の有理関数として表せることを示す。 $f(z)$ の極を (位数込みで³⁷⁵) $\pm a_i$ 、ゼロ点を (位数込みで) $\pm b_j$ と書くことにする。すると

$$\frac{(\wp(z) - \wp(b_1))(\wp(z) - \wp(b_2)) \cdots}{(\wp(z) - \wp(a_1))(\wp(z) - \wp(a_2)) \cdots} \quad (21.124)$$

は $f(z)$ と (位数込みで) 同じ極とゼロ点を持つ。そのため、定理 21.5 により、これは $f(z)$ の定数倍である。

また、任意の奇関数 $g(z)$ について、 $g(z)/\wp'(z)$ は偶関数である。上の結果により、 $g(z)/\wp'(z)$ は $\wp(z)$ の有理関数で表せる。

さて、任意の関数は必ず偶関数と奇関数の和で表せる³⁷⁶。そのため、以下の定理が得られる。

定理 21.7. 任意の二重周期関数は、同じ二重周期を持つ $\wp(z)$ と $\wp'(z)$ の有理関数として表せる。

[21-4]. $\wp''(z)$ を $\wp(z)$ の二次の多項式で表せ。

³⁷⁵ 点 x が位数 n の極である場合には、 a_i は n 回 x をとるとのこと。

³⁷⁶ $h(z)$ に対し、 $f(z) = (h(z) + h(-z))/2$ 、 $g(z) = (h(z) - h(-z))/2$ とすればよい。